

# THESE

Présentée par  
**Sylvain QUEYREAU**

Pour obtenir le grade de  
**DOCTEUR de l'UNIVERSITE PIERRE ET MARIE CURIE**

Spécialité  
**Physique et Chimie des Matériaux**

## **ETUDE DES MECANISMES D'ECROUISSAGE SOUS IRRADIATION DE LA FERRITE PAR SIMULATIONS DE DYNAMIQUE DE DISLOCATIONS**

Soutenue le 8 février 2008,

devant le jury composé de :

---

Benoit DEVINCRE	Directeur de Recherche	CNRS-LEM	Directeur de thèse
Ghiath MONNET	Ingénieur de Recherche	EDF R&D-MMC	Codirecteur de thèse
Samuel FOREST	Directeur de Recherche	CNRS-Centre des Matériaux	Rapporteur
Patrick FRANCIOSI	Directeur de Recherche	CNRS-LPMTM	Rapporteur
David BACON	Professor	University of Liverpool	Examineur
Gabriel FAIVRE	Directeur de Recherche	CNRS-INSP	Président
Marc FIVEL	Chargé de Recherche	CNRS-LGPM2	Examineur
Bernard MARINI	Ingénieur de Recherche	CEA-SRMA	Examineur

---



# Remerciements

J'ai croisé beaucoup de monde durant cette expérience et je vais donc essayer de n'oublier personne.

Je remercie en premier lieu Benoit Devindre et Ghiath Monnet pour m'avoir proposé un beau sujet de recherche : complexe, original et ambitieux. Leur encadrement a été différent mais complémentaire tant sur le plan personnel que scientifique, et c'est tant mieux. Bien sur, il y a eu quelques couacs mais ça fait parti du travail et nous avons su les surmonter. Je pense que l'on peut être satisfait du travail accompli. Et sans aucune fausse courtoisie, j'ai énormément appris de leur très grande compétence scientifique.

Je tiens à mentionner ceux avec qui j'ai partagé de nombreuses discussions stimulantes et de haute volée, notamment Antoine Ambart, Laurent Legras, Dominique Loissard, Christophe Domain, Ronan Madec, Ladislav Kubin, Olivier Diard et plus récemment Gilles Adjanor. Je pense aussi à Jean-Paul Massoud, que j'ai d'abord connu pour ses conseils amicaux, avant qu'il ne prenne les rennes du groupe Metallurgie, et je le remercie pour sa confiance. Je remercie les nombreux relecteurs de mon manuscrit que j'ai usé jusqu'à l'os : Ghiath et Benoit, mes parents, Anaïs, Christophe et Damien.

Ensuite, sur un plan plus personnel, je dois énormément à mes parents. J'ai donc de tendres pensées pour ma mère qui est toujours là pour ses enfants et pour mon père qui m'a donné le goût de la science. Je pense également à ma famille au sens large : les « mayennais », les « bordelais », ma grand-mère, et aussi ces amis que l'on considère comme des frères (ils se reconnaîtront).

Je termine cette (longue) série par un clin d'oeil spécial à mes trois compagnons de laboratoire qui vont me manquer : à Sanae ma petite grande soeur (et vice et versa), à Pär pour sa spécificité que j'apprécie tant, et Hadrien mon colocataire de bureau et frère d'arme, on s'est supporté (dans tous les sens du terme) et soutenu l'un l'autre. C'est une tranche de vie que l'on a partagé ensemble.

Ma thèse aura aussi été riche en activités et remplie de bons moments. Je suis donc reconnaissant en vrac : à tous mes amis, ceux avec qui j'ai refait le monde, mes mentors, mes nombreux partenaires sportifs, mes copains musiciens, mes hébergeurs, mes rencontres, ma muse, et le légendaire Kaldi. Je pense en particulier à Amadou, Bruno, David, Emeline, Frederic, Géraud, Jean-Philippe, Laurie, Loïc, Lucie, Maria, Stephanie, et Raoul. Il s'agit de la dernière liste des personnes que je souhaitais citer, ce qui ne veut pas dire qu'il s'agit des moins importants.

*« La théorie, c'est quand on sait tout et que rien ne fonctionne. La pratique, c'est quand tout fonctionne et que personne ne sait pourquoi. Si la pratique et la théorie sont réunies, rien ne fonctionne et on ne sait pas pourquoi. »*

[Albert Einstein]

*A ma famille.*



# Table des matières

<b>INTRODUCTION GENERALE.....</b>	<b>5</b>
<b>CHAPITRE I. MICROSTRUCTURE ET COMPORTEMENT PLASTIQUE DES ACIERS DE CUVE .....</b>	<b>11</b>
<b>I.1. Etude bibliographique de la microstructure des aciers de cuve</b>	<b>11</b>
I.1.1. Elaboration et microstructure attendue	12
I.1.2. La microstructure bainitique des aciers de cuve	14
I.1.3. Cristallographie	18
I.1.4. Microstructure des dislocations	19
<b>Résumé</b>	<b>20</b>
<b>I.2. Etude bibliographique du comportement mécanique des monocristaux de fer</b>	<b>21</b>
I.2.1. Les systèmes de glissement observés	21
I.2.2. La dépendance en orientation	23
I.2.3. Influence de la température	29
I.2.4. Le glissement dévié	31
I.2.5. Comparaison avec le comportement des CFC	32
<b>Résumé</b>	<b>33</b>
<b>Bibliographie</b>	<b>34</b>
<b>CHAPITRE II. METHODOLOGIE.....</b>	<b>37</b>
<b>Introduction</b>	<b>37</b>
<b>II.1. Quelles simulations pour les aciers de cuve</b>	<b>38</b>
II.1.1. Choix des systèmes de glissement actifs	38
II.1.2. Prise en compte de la présence des éléments d'alliage	39
II.1.3. Prise en compte de la morphologie bainitique des aciers de cuve	41
<b>Résumé</b>	<b>42</b>
<b>II.2. Introduction au code de dynamique de dislocations microMégas</b>	<b>43</b>
II.2.1. Discrétisation de l'espace dans la structure cubique centrée	45
II.2.2. Calcul des forces sur les segments	46
II.2.3. Loi de mobilité	48
II.2.4. Règles locales	49
II.2.5. Détection des obstacles	50
II.2.6. Traitement des particules	51
II.2.7. Problèmes induits par les Conditions aux Limites	52
<b>II.3. Tests élémentaires de validation</b>	<b>55</b>
II.3.1. Influence de la longueur de la source	55

II.3.2. Influence de la longueur de discrétisation	57
II.3.3. Influence du pas de temps	59
<b>Résumé</b>	<b>61</b>
<b>Bibliographie</b>	<b>62</b>
<b>CHAPITRE III. DURCISSEMENT ASSOCIE AUX INTERACTIONS ENTRE DISLOCATIONS.....</b>	<b>65</b>
<b>Introduction</b>	<b>65</b>
<b>III.1. Rappels bibliographiques sur le mécanisme de la forêt</b>	<b>66</b>
III.1.1. Les différentes interactions entre les systèmes de plans {110}	68
III.1.2. Les travaux portant sur une jonction individuelle	70
III.1.3. Autres approches visant à définir les coefficients d'interaction	72
III.1.4. Détermination des coefficients d'interaction par simulations de DD	73
<b>III.2. Etude du mécanisme de la forêt par simulations de DD</b>	<b>77</b>
III.2.1. Etude de sensibilité aux paramètres de simulations	78
III.2.2. Détermination des coefficients d'interaction	82
III.2.3. Validation : simulation du glissement double	91
<b>Résumé</b>	<b>99</b>
<b>Bibliographie</b>	<b>100</b>
<b>CHAPITRE IV. DURCISSEMENT STRUCTURAL .....</b>	<b>103</b>
<b>Introduction</b>	<b>103</b>
<b>IV.1. Durcissement associé aux carbures</b>	<b>104</b>
IV.1.1. Les carbures dans les aciers de cuve	104
IV.1.2. Durcissement induit par une rangée périodique infinie de particules	106
IV.1.3. Durcissement induit par une distribution aléatoire de carbures	113
<b>IV.2. Composition des mécanismes de durcissement par précipitation et de la forêt</b>	<b>121</b>
IV.2.1. Revue des différents travaux de superposition de mécanismes	121
IV.2.2. Simulations avec forêt et carbures	125
<b>IV.3. Discussion du rôle des barrières microstructurales de la bainite</b>	<b>133</b>
<b>Résumé</b>	<b>135</b>
<b>Bibliographie</b>	<b>136</b>
<b>CHAPITRE V. INFLUENCE DU GLISSEMENT DEVIÉ .....</b>	<b>139</b>
<b>Introduction</b>	<b>139</b>
<b>V.1. Influence du glissement dévié sur le mécanisme de la forêt</b>	<b>140</b>
V.1.1. Revue bibliographique	140
V.1.2. Influence du glissement dévié sur un système de glissement isolé	142
V.1.3. Effet du glissement dévié sur le durcissement de la forêt	145



<b>Résumé</b>	<b>147</b>
<b>V.2. Le rôle du glissement dévié sur le durcissement associé aux carbures</b>	<b>147</b>
<b>Résumé</b>	<b>156</b>
<b>V.3. Vers un modèle rendant compte de l'ancrage des systèmes de glissement par la déviation</b>	<b>156</b>
V.3.1. L'effet durcissant du glissement dévié	157
V.3.2. Evolution des densités de dislocations	159
V.3.3. Validation : simulation du glissement simple avec glissement dévié	161
<b>Résumé</b>	<b>163</b>
<b>Bibliographie</b>	<b>164</b>
<b>CHAPITRE VI. DURCISSEMENT INDUIT PAR LES DEFAUTS D'IRRADIATION .</b>	<b>167</b>
<b>Introduction</b>	<b>167</b>
<b>VI.1. Les défauts d'irradiation dans les aciers de cuve</b>	<b>168</b>
VI.1.1. Conditions d'irradiation et défauts formés	168
VI.1.2. Microstructure d'irradiation	170
VI.1.3. La force des défauts individuels	174
<b>VI.2. Etude du durcissement des cavités par dynamique de dislocations</b>	<b>178</b>
VI.2.1. Loi de transition d'échelle	178
VI.2.2. Durcissement induit par la microstructure des cavités	182
VI.2.3. Vers une description complète de l'état irradié	189
<b>Résumé</b>	<b>192</b>
<b>Bibliographie</b>	<b>193</b>
<b>CONCLUSION GENERALE.....</b>	<b>197</b>
<b>PERSPECTIVES.....</b>	<b>201</b>
<b>ANNEXE A. BASE DE VECTEURS DE DISCRETISATION POUR LA STRUCTURE CUBIQUE CENTREE .....</b>	<b>205</b>
<b>ANNEXE B. PROCEDURE DE DETECTION DES OBSTACLES .....</b>	<b>207</b>
<b>ANNEXE C. PARAMETRES D'ENTREE DES SIMULATIONS.....</b>	<b>210</b>
<b>ANNEXE D. MATRICE D'INTERACTION ENTRE LES SYSTEMES {110}.....</b>	<b>214</b>



---

## INTRODUCTION GENERALE

---

Le parc nucléaire français est composé de Réacteurs à Eau Pressurisée (REP), dont la cuve est un élément clef de la sûreté des centrales. La cuve est une partie intégrante du circuit primaire et constitue ainsi la deuxième barrière de confinement du combustible vis-à-vis de l'environnement. Il s'agit d'un réservoir cylindrique forgé dans un acier 16MND5. Ses dimensions importantes, 200 mm d'épaisseur et un diamètre de près de quatre mètres, en font un matériel dit non remplaçable qui limite directement la durée de vie des centrales.

Au cours du fonctionnement des REP, les cuves sont soumises à la fois à un chargement thermomécanique : une pression de 150 bars et une température moyenne de 300 °C, mais aussi au rayonnement neutronique produit par le cœur du réacteur. Le ralentissement des neutrons rapides (d'une énergie > 1000 eV) s'opère par diffusion élastique, c'est-à-dire par le transfert d'une partie de leur énergie cinétique aux noyaux des atomes heurtés. Ces derniers sont par conséquent chassés de leur site initial dans le réseau cristallin, créant ainsi des défauts ponctuels, lacunes et interstitiels. Ces objets se regroupent en amas qui constituent des obstacles forts au mouvement des dislocations. L'irradiation neutronique augmente, par conséquent, la limite élastique mais entraîne en contrepartie une perte de ductilité du matériau, comme le montre la figure 1(a).

L'évolution réelle de la fragilisation des centrales est suivie par le Programme de Surveillance de l'Irradiation (PSI). Des essais de ténacité sont réalisés périodiquement sur des éprouvettes issues de la cuve elle-même. Elles sont placées à l'intérieur du réacteur où elles reçoivent un flux supérieur à celui des cuves. La figure 1(b) illustre l'influence de l'irradiation sur l'évolution de la résilience. L'irradiation étend le domaine de rupture fragile et abaisse le palier ductile. La zone de transition fragile-ductile se trouve décalée vers les plus hautes températures au fur et à mesure que la dose d'irradiation (ou fluence) augmente. Ce décalage de la zone de transition a fait l'objet de nombreux travaux à la fois dans le cadre du PSI ou par des irradiations en réacteurs expérimentaux. Il existe des formules de prévision qui rendent compte des paramètres gouvernant ce phénomène. Il s'agit en particulier de la dose d'irradiation, et de

certaines éléments d'alliage comme le Cu, le P et le Ni qui ont été identifiés comme des éléments fragilisants.

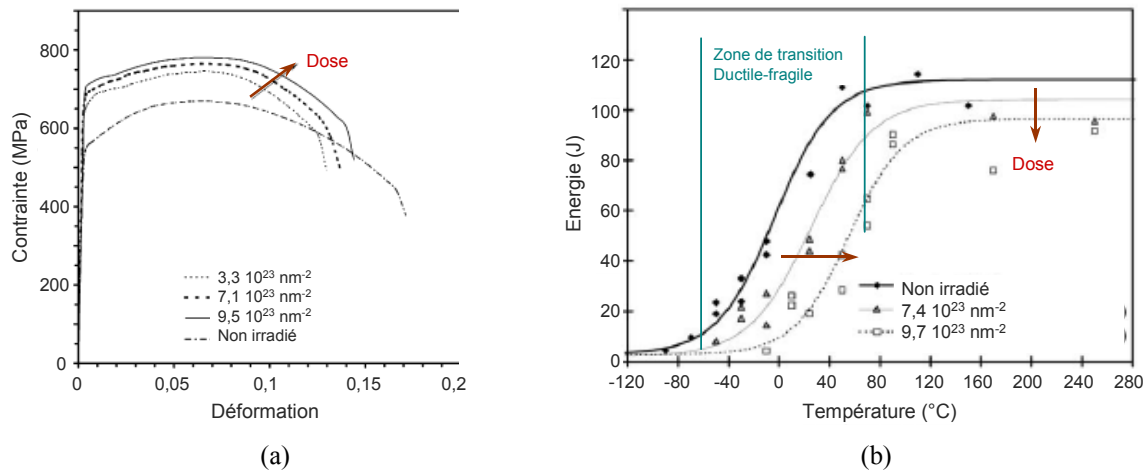


Figure 1 : effet de l'irradiation aux neutrons à 275 °C sur le comportement mécanique de l'acier de cuve. (a) courbes de traction à l'ambiante et (b) courbes de résilience. Les doses sont données pour les neutrons de haute énergie supérieure à 1 MeV. La dose reçue par les cuves françaises après 40 ans de fonctionnement est de  $6,5 \cdot 10^{23} \text{ nm}^{-2}$ . Données issues de [P. Haušild, M. Kytka, M. Karlík, P. Pešek, J. Nucl. Mater. **341**, 184 (2005)].

Malgré les bons résultats des formules de prédiction, le comportement mécanique des aciers de cuve sous irradiation reste encore mal connu. De nombreuses investigations, dont le présent travail, sont effectuées afin de fournir une meilleure compréhension de la physique mise en jeu et d'améliorer les schémas prédictifs actuels.

Cette thèse de doctorat s'intègre dans le projet européen PERFECT (Prediction of Irradiation Damage Effects in Reactor Components) qui regroupe des acteurs majeurs du secteur nucléaire en Europe. Il s'agit d'un projet ambitieux, qui cherche à prédire l'évolution de la microstructure et du comportement mécanique de composants importants des REP, dont les aciers de cuve. Dans ce but, des simulations multi-échelles sont mises en place portant sur toutes les échelles concernées par le dommage d'irradiation. Dans ce contexte, cette étude relie l'évolution de la microstructure aux propriétés mécaniques à l'échelle mésoscopique. La finalité étant d'établir, à l'aide de simulations de Dynamique de Dislocations (DD), une loi constitutive du comportement plastique justifiée physiquement pour de la ferrite, la phase majoritaire des aciers de cuve. Ce travail se focalise sur le comportement athermique, couvrant un domaine de température allant de l'ambiante aux conditions normales d'exploitation. Le comportement à basse température fait, quant à lui, l'objet du travail de thèse de S. Naamane, financé également par le projet PERFECT. Le travail présenté dans ce mémoire est connecté à d'autres travaux

dans le projet, comme les simulations atomiques de l'interaction entre dislocations et défauts d'irradiation, les calculs de cinétique chimique visant à prédire la microstructure d'irradiation ou encore l'étude du comportement macroscopique au moyen de calculs d'agrégats cristallins par éléments finis.

**Les problématiques physiques** posées par cette étude sont multiples. En premier lieu, les aciers de cuve présentent une microstructure bainitique. Le comportement plastique est associé à différents mécanismes de durcissement, dont il est nécessaire d'estimer la contribution et l'importance relative. Il s'agit en particulier de l'effet des éléments d'alliage en solution solide, des interactions avec les dislocations dans la microstructure initiale, du durcissement par précipitation associé aux carbures, de la présence des interfaces entre les lattes de ferrite, et, pour finir, des interactions avec les différents défauts d'irradiation.

La DD est certainement la technique la plus adaptée à l'étude détaillée de ces mécanismes. Elle permet de reproduire le comportement collectif tridimensionnel des dislocations en tenant compte de toutes les interactions sans variable ajustée.

Des résultats récents obtenus à l'aide de la DD [B. Devincere, L. Kubin, T. Hoc, *Scripta Mat.* **57**, 905 (2007)] ont mis en évidence le rôle complexe du glissement dévié sur l'érouissage dans les métaux de structure cubique-à-faces-centrées. Ce mécanisme agit, suivant le taux de déformation, comme un mécanisme de durcissement puis comme un mécanisme adoucissant. Cependant, la transposition de ces effets à notre cas n'est pas simple, étant donné notre connaissance limitée sur l'activité du glissement dévié dans le fer. Un chapitre est consacré à la présentation des premiers résultats des simulations DD sur les possibles conséquences de ce mécanisme sur les deux sources de durcissement : les interactions dislocations-dislocations et dislocations-carbures.

Une fois la contrainte d'écoulement sur l'état initial calculée, le durcissement induit par les défauts d'irradiation peut-être étudié. La caractérisation complète de la microstructure d'irradiation est une première difficulté expérimentale, à cause de la nature et la taille nanométrique des défauts, mais aussi de l'influence des conditions d'irradiation et de la composition. L'interaction entre une dislocation et un défaut d'irradiation individuel est bien souvent complexe. Il est important de savoir parmi tous ces objets (amas d'interstitiels, de solutés et de lacunes) quels sont les plus durcissant et quel est le durcissement correspondant. Les mécanismes de durcissement sont donc nombreux et assez différents. Pris séparément, ils donnent lieu à des contributions significatives. Une question d'importance reste à savoir comment tous ces mécanismes associés à des obstacles différents se superposent et s'ils interagissent entre eux. Il s'agit d'un problème théorique complexe et ancien. Là-aussi, les simulations DD peuvent donner les éléments clefs pour trancher la question du choix de la loi

de mélange.

Enfin, la plupart des modèles relatifs à ces mécanismes font apparaître des relations entre densité de dislocations et densités de carbures et de défauts d'irradiation. Or, durant la déformation plastique la densité de dislocations évolue fortement. Une description complète du comportement plastique requière donc la description de l'évolution de la densité des systèmes de glissement en cours de déformation. Cet aspect est discuté dans ce mémoire.

**L'organisation du mémoire** suit les problèmes métallurgiques abordés. Pour débiter, le premier chapitre détaille les caractérisations expérimentales de ce matériau pour définir une microstructure modèle représentative des aciers de cuve. Puis, la seconde moitié du chapitre est consacrée à la revue des informations concernant le comportement plastique cristallin du fer dans le régime athermique.

Pour répondre aux besoins de cette étude, bon nombre d'évolutions ont été apportées au code de DD microMégas (mM), utilisé dans ce travail. Elles sont présentées avec les principes de fonctionnement dans le deuxième chapitre. En particulier, nous verrons les changements relatifs à la prise en compte de la structure cristallographique cubique-centrée, le traitement à trois dimensions d'obstacles cisailables ou impénétrables. Enfin, les difficultés spécifiques liées à la taille nanométrique des défauts d'irradiation sont discutées.

Ensuite, les résultats de cette étude sont décomposés en quatre chapitres qui correspondent aux différents mécanismes opérant dans ces aciers. Le chapitre III se concentre sur les interactions entre dislocations, c'est-à-dire le mécanisme de la forêt. Les coefficients de la matrice d'interaction qui constituent le lien entre la contrainte d'écoulement et les densités de dislocations sont déterminés.

Le durcissement associé aux carbures présents dans la matrice ferritique est étudié au chapitre IV. Pour cela deux configurations sont considérées. D'abord, l'interaction d'une dislocation infinie avec une rangée périodique de carbures permet de valider notre méthode et de retrouver certains résultats fondamentaux. D'autre part, le durcissement associé à une distribution aléatoire de carbures est déterminé et comparé aux modèles théoriques. Finalement, la superposition du durcissement par précipitation et le mécanisme de la forêt est discutée.

Les simulations menées jusqu'alors supposent le glissement idéal des dislocations en négligeant le mécanisme important de glissement dévié des dislocations de caractère vis. Le chapitre V s'attache à montrer l'influence de ce mécanisme à la fois sur les interactions avec la forêt et le durcissement des carbures.

Enfin, le mémoire s'achève logiquement par l'étude du durcissement induit par l'irradiation. Pour cela, une synthèse bibliographique est présentée dans le but de définir la microstructure d'irradiation et les propriétés importantes des défauts d'irradiation. Nous proposons une loi de

transition d'échelle pour assurer le lien entre les résultats des simulations atomiques et la force des défauts d'irradiation individuels dans la DD. La contrainte d'écoulement associée à une microstructure simplifiée d'irradiation est définie. Une discussion concernant le durcissement global des aciers de cuve par irradiation conclura cette étude.





---

# CHAPITRE I. MICROSTRUCTURE ET COMPORTEMENT PLASTIQUE DES ACIERS DE CUVE

---

<b>I.1. Etude bibliographique de la microstructure des aciers de cuves</b>	<b>11</b>
I.1.1. Elaboration et microstructure attendue	12
I.1.2. La microstructure bainitique des aciers de cuve	14
I.1.3. Cristallographie	18
I.1.4. Microstructure des dislocations	19
<b>Résumé</b>	<b>20</b>
<b>I.2. Etude bibliographique du comportement du monocristal de fer</b>	<b>21</b>
I.2.1. Les systèmes de glissement observés	21
I.2.2. La dépendance en orientation	23
I.2.3. Influence de la température	29
I.2.4. Le glissement dévié	31
I.2.5. Comparaison avec le comportement des CFC	32
<b>Résumé</b>	<b>33</b>
<b>Bibliographie</b>	<b>34</b>

---

## **I.1. Etude bibliographique de la microstructure des aciers de cuve**

Afin de fournir une bonne prédiction du comportement des aciers de cuve, il est important de disposer d'une connaissance détaillée du matériau. Cette première partie va donc s'attacher à décrire le plus fidèlement la microstructure qui confère au matériau ses propriétés mécaniques. Pour cela, nous commencerons par évoquer l'élaboration des aciers de cuve pour introduire d'une manière générale la microstructure qui en découle. Puis dans un deuxième temps, les différents constituants seront détaillés.

Cette étude bibliographique s’attachera à définir un certain nombre d’informations clefs comme les dimensions et formes caractéristiques des différentes phases qui composent cet acier, leurs relations d’orientation, et la microstructure des dislocations.

Cette partie regroupe également quelques références à d’autres aciers bainitiques lorsque l’information venait à manquer dans le cas des aciers de cuve.

### I.1.1. Elaboration et microstructure attendue

Les cuves des réacteurs à eau sous pression sont constituées d’un acier faiblement allié au Manganèse-Nickel-Molybdène. Sa composition moyenne est indiquée dans le tableau I.1. Elle est comparable à la composition d’autres nuances également utilisées pour le nucléaire, telles que les aciers de norme américaine A533B et SA508Cl.3.

Tableau I.1. Composition chimique de l’acier 16MND5, exprimée en % massique.

C	Mn	Ni	Mo	Si	Cr	Cu	Al	S	P
0,159	1,37	0,70	0,50	0,24	0,17	0,06	0,023	0,008	0,005

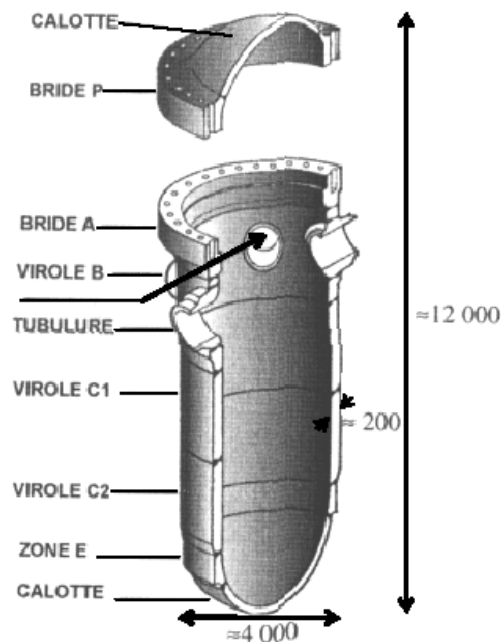


Figure I.1. Vue de coupe d’une cuve de réacteur à eau sous pression indiquant les principales pièces et dimensions (en mm) [Haušild 2002].

Les cuves sont composées par un assemblage de viroles qui sont obtenues par différents forgeages. La figure I.1 schématise les multiples parties et dimensions d’une cuve. Les viroles une fois forgées, subissent une série de trois traitements thermiques pour modifier leur microstructure :

- deux austénitisations à des températures de 900 et 865 °C, pendant respectivement 6h et 4h, suivie chacune d'une trempe à l'eau,
- chacune de ces austénitisations est suivie d'un revenu à une température de 650 °C et pour une durée d'au moins 5h,
- un dernier revenu de 615°C pour une durée de 8h.

La première trempe confère aux aciers de cuve une microstructure bainitique. La ferrite présente une morphologie aciculaire, c'est-à-dire sous forme d'enchevêtrements de paquets de lattes ou plaquettes, parfois appelées lames. Le carbone en sursaturation précipite entre les lattes de ferrite sous forme de plaquettes, on parle alors de bainite supérieure (*cf.* figure I.2). Pour des vitesses de refroidissement plus importantes, la cémentite se forme également à l'intérieur des lattes sous forme d'aiguilles, on parle alors de bainite inférieure. La seconde austénitisation a pour but d'affiner la microstructure. Enfin l'acier est détensionné à l'aide du dernier revenu, assez long. La microstructure obtenue après cette succession de traitements est désignée comme une bainite revenue.

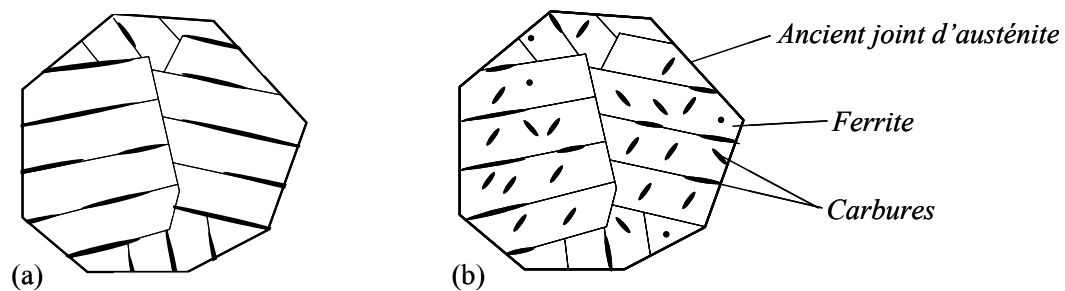


Figure I.2. Représentation schématique de (a) la bainite supérieure, (b) la bainite inférieure.

Pour affiner à présent la description de la microstructure, il est nécessaire de revenir sur la première trempe que subit l'acier. La figure I.3 présente le diagramme de Transformation en Refroidissement Continu (TRC) des aciers de cuve [Le Bec *et al.* 1995]. Les domaines de transformations des différentes phases (martensite, bainite et ferrite perlitique) sont représentés, en fonction de la température et du temps, pour des refroidissements à vitesse constante. La cuve étant relativement massive (environ 200 mm d'épaisseur), le cœur du matériau subit une vitesse de refroidissement inférieure à celle subie à peau, respectivement 0,3 et 4 °C/s. Les courbes de refroidissement approximatives pour ces deux régions des viroles sont indiquées dans la figure I.3. Il découle alors que les microstructures à cœur et à peau diffèrent un peu. A cœur, il se forme de la bainite et jusque 50% de ferrite et de perlite alors que, à peau, le refroidissement conduit entièrement à la formation de bainite. La partie qui suit va s'intéresser à présenter les différentes observations de la microstructure.

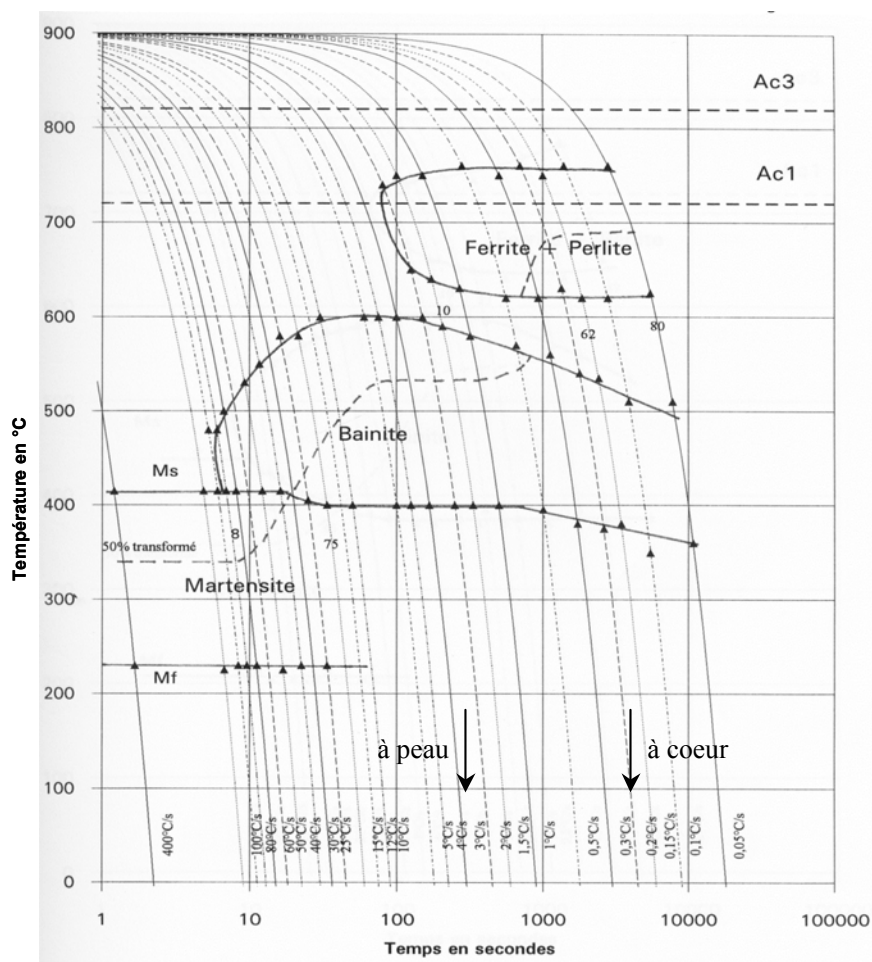


Figure I.3. Diagramme de transformation en refroidissement continu des aciers de cuve [Le Bec *et al.* 1995].

### I.1.2. La microstructure bainitique des aciers de cuve

La microstructure des aciers de cuve est relativement peu traitée dans la littérature. En outre, les interprétations de la microstructure sont très variables d'une étude à l'autre. Le cliché optique en figure I.4 illustre bien toute la difficulté qu'il existe à interpréter cette microstructure. Passons brièvement les différentes interprétations en revue.

La microstructure est parfois interprétée comme une bainite granulaire revenue, c'est-à-dire : de la ferrite aciculaire ou granulaire suivant les régions [Sestier 1998]. La ferrite est quasiment dépourvue de précipités et les carbures sont regroupés en agglomérats. Dans d'autres travaux, la microstructure est décrite soit comme de la bainite inférieure soit de la bainite supérieure suivant les régions observées [Miloudi 1997]. Pesci *et al.* proposent également une interprétation assez proche : une microstructure majoritairement composée de bainite supérieure avec des îlots de bainite inférieure [Pesci *et al.* 2003, Pesci 2004]. Certaines études récentes

décrivent plutôt une microstructure composée de bainite supérieure et de ferrite aciculaire [Haušild 2002, Novaha *et al.* 2003]. Des résidus de perlite ou des anciens joints triples de grains d'austénite sont parfois visibles [Haušild 2002]. Enfin, certains auteurs préfèrent simplement le terme de bainite revenue, qui a pour avantage de rappeler les traitements subis par le matériau [Carassou 2000, Mathieu 2006].

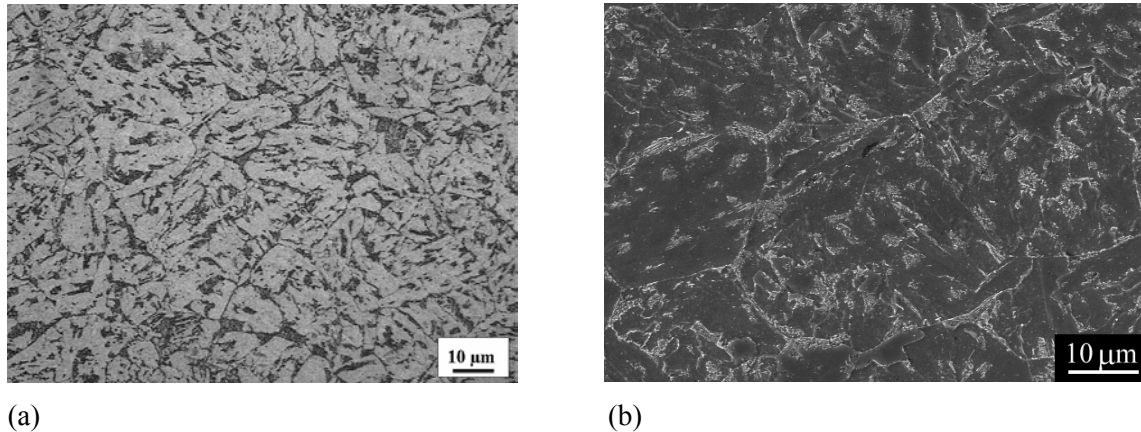


Figure I.4. (a) Micrographie de la microstructure des aciers de cuve obtenue au microscope optique [Haušild 2002] et (b) à un plus fort grossissement.

Il ne s'agit pas ici seulement d'un désaccord dans la dénomination de la microstructure, mais de l'interprétation de microstructures différentes, prélevées à des épaisseurs différentes. On retiendra, que d'une part les aciers de cuve sont constitués majoritairement de bainite comme le montre l'analyse du diagramme TRC et la majorité des observations. Et d'autre part, la microstructure est en fait un « agrégat de deux bainites »: une bainite pauvre en carbures, et des îlots plus petits dans lesquels se trouvent des amas de carbures. Les paragraphes qui suivent vont décrire plus finement les différents constituants de cette microstructure.

### La ferrite

Que cela soit au Microscope optique ou Electronique à Balayage (MEB), les lattes de ferrite sont souvent difficilement distinctes. Il est alors délicat de définir une géométrie et des dimensions représentatives de la ferrite. Cependant, il est généralement admis que les lattes de ferrite d'un même paquet sont désorientées seulement de moins de  $2^\circ$ , ce qui laisse à penser l'existence de murs de dislocations entre les lattes [Bhadeshia, 2000]. Suivant la méthodologie proposée par Gourgues *et al.* [Gourgues *et al.* 2001], Haušild [Haušild 2002] a réalisé une étude par Electron Backscattered Diffraction (EBSD) de la bainite des aciers de cuve. L'idée sous jacente est de définir les paquets de lattes non plus de manière morphologique à partir d'observations au microscope, mais de manière cristallographique, à partir de cartographies

d'orientation. Les régions de même orientation correspondent à un même paquet de lattes. L'atout majeur de cette démarche est de permettre la distinction de plusieurs paquets cristallographiques à l'intérieur de paquets morphologiques, et inversement (*cf.* figure I.5). Haušild obtient alors une détermination précise de la distribution de taille des paquets de lattes. Leur taille moyenne est de 10  $\mu\text{m}$ , pouvant aller jusque 25  $\mu\text{m}$  et les paquets semblent être équiaxes. La taille moyenne des anciens grains d'austénite étant de 30  $\mu\text{m}$ , le nombre de paquets de lattes issus d'un même grain d'austénite est estimé de quelques paquets à une quinzaine.

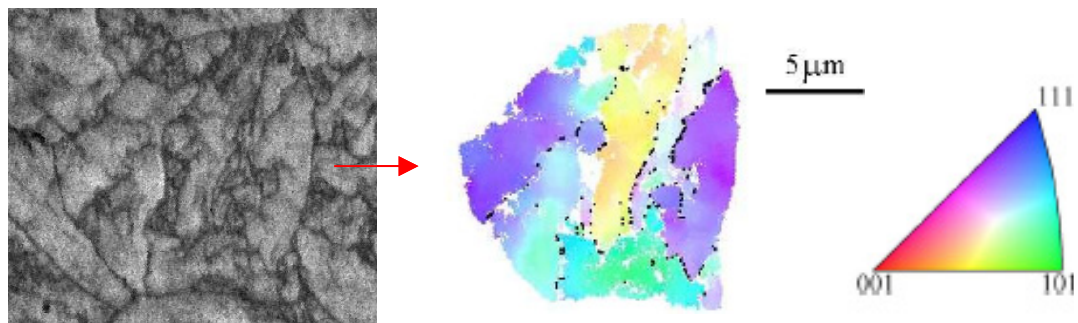


Figure I.5. Illustration d'une étude par EBSD des aciers de cuve, qui permet de révéler plus clairement les joints entre les lattes, ici appartenant à un même grain austénitique. D'après [Haušild 2002].

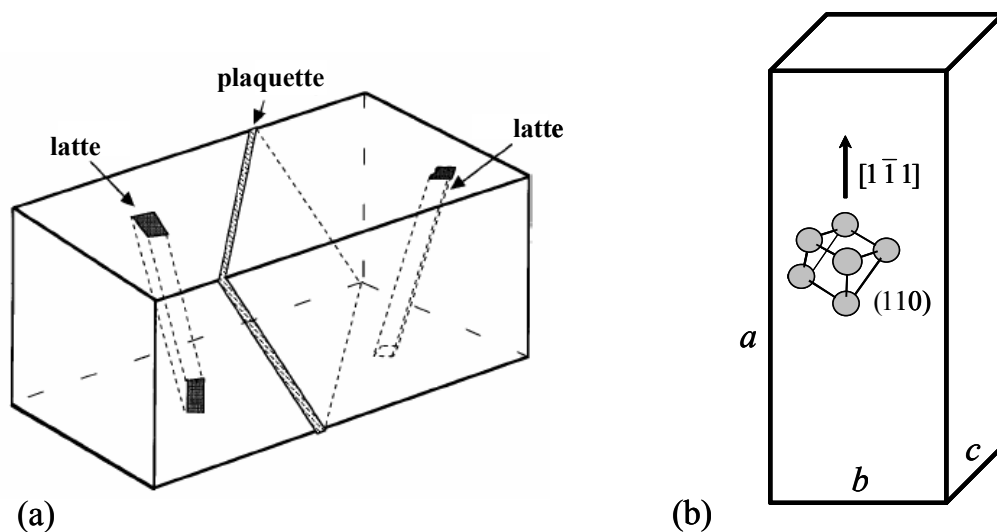


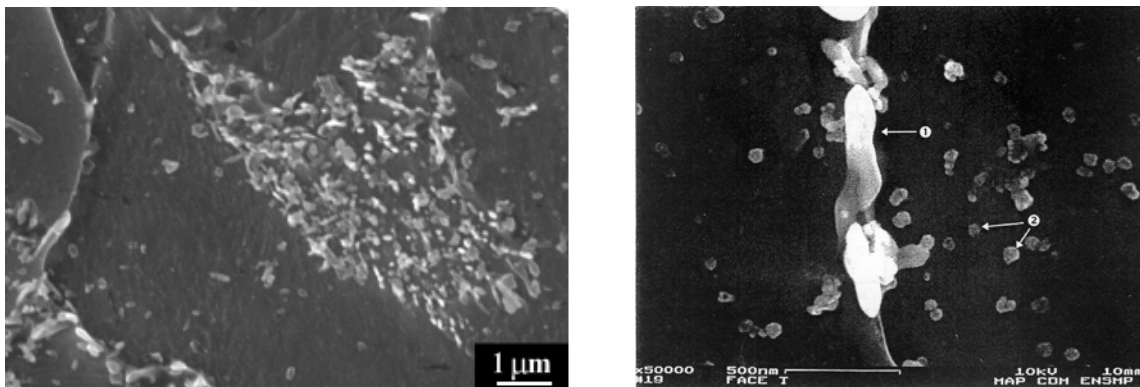
Figure I.6. (a) Schématisation des deux formes que peut prendre la ferrite : en latte ou en plaquette [Bhadeshia, 2000], (b) Latte de ferrite d'une bainite supérieure idéalisée en parallélépipède.

Les lattes individuelles présentent une longueur moyenne de 10  $\mu\text{m}$  et une épaisseur de l'ordre de 1 à 2  $\mu\text{m}$ . Ces dernières sont plus facilement observées au Microscope Electronique à Transmission (MET). La question de la dernière dimension de la latte reste ouverte. Pour simplifier dans ce qui suit, les lattes sont idéalisées en parallélépipèdes de dimensions  $a > b > c$ .

Deux géométries différentes sont observées dans la littérature (voir figure I.6 (a)), soit la ferrite est sous forme de lattes allongées ( $a$  très supérieur à  $b$  et  $c$ ), soit plus proche de la forme d'une plaquette ( $c$  très petit comparé à  $a$  et  $b$ ). La bainite supérieure est presque toujours observée en forme de latte, alors que la bainite inférieure peut être trouvée selon les deux formes [Bhadeshia, 1990, 2000, Ohmori, 1991, 2002]. La raison de la différence concernant la croissance des lattes de ferrite n'est pas totalement comprise. Il a cependant été montré que la croissance en plaquette est favorisée pour des températures de transformation bainitique basse (200 – 300 °C) et dépend également de la teneur en élément d'alliage [Bhadeshia 2000].

Enfin, la description ne serait pas complète sans la présentation des orientations des interfaces. Dans la majorité des bainites de la littérature, la direction d'allongement correspond à une direction dense du cristal de fer ( $\alpha$ )  $\langle 111 \rangle_\alpha$ . Le plan d'habitat de la ferrite est, quant à lui, moins bien clairement défini. Il est majoritairement observé comme un plan dense  $\{110\}_\alpha$  pour une bainite supérieure, mais il semble irrationnel pour une bainite inférieure [Hoekstra 1977, Srinivasan 1967, Bhadeshia 2000].

### Les carbures



(a) (b)  
Figure I.7. Micrographies obtenues au MEB, (a) les lattes de ferrite ne sont pas totalement dépourvues de carbures [Haušild 2002] et (b) les carbures les plus épais se trouvent aux joints interlattes (1) [Carassou 2000].

Les carbures dans les aciers de cuve sont essentiellement composés de cémentite [Carassou 2000]. Des mesures par microanalyse X ont montré que la cémentite contient outre le fer qui est majoritaire, du manganèse, du chrome et du molybdène [Martin 1990]. Leur répartition est très hétérogène, comme nous l'avons vu au paragraphe précédent, la majorité se trouve dans des amas. Le cliché obtenu au MEB en figure I.7.a, illustre la différence de répartition de carbures dans les aciers de cuve. Les plus gros précipités sont allongés et se trouvent entre les lattes de ferrite ou dans les amas (voir figure I.7.b). Par contre, contrairement à ce qui est souvent

suggéré, les lattes de ferrite (hors amas) ne sont pas totalement dépourvues de précipités, ils sont généralement séparés de moins d'un micromètre. Les carbures interlattes sont généralement d'une épaisseur de 0,2  $\mu\text{m}$  et d'une longueur pouvant atteindre 1 à 2  $\mu\text{m}$ . La majorité des précipités intralattes semble sphérique ou légèrement elliptique. Leur taille moyenne est de l'ordre de 0,1  $\mu\text{m}$ .

### Les inclusions

Puisque, le cœur et la peau ne refroidissent pas à la même vitesse lors de la solidification du lingot d'acier, des zones de ségrégations chimiques se forment suivant l'épaisseur du lingot. Dans les zones très ségréguées, peuvent alors se former des inclusions de sulfure de manganèse MnS. Suivant la forme du lingot, les inclusions se trouvent au cœur de la virole ou à peau interne. Les traitements thermiques que subit ensuite la virole n'affectent pas leur présence.

Haušild ainsi que Carassou [Haušild 2002, Carassou 2000] ont réalisé une analyse inclusionnelle à partir d'observations dans les sens circonférentielle, axial et radial de la virole. Il en ressort que les inclusions sont de forme allongée suivant la direction circonférentielle. D'une longueur allant de 20 à 100  $\mu\text{m}$  [Pesci, 2004], leur diamètre moyen est de l'ordre de 10  $\mu\text{m}$ . Haušild et Carassou ont également estimé la fraction volumique de ces inclusions de l'ordre de 0,057 %. Etant donné leur faible fraction volumique, il est raisonnable de penser que les inclusions jouent un rôle négligeable dans le comportement mécanique des aciers de cuve. Il n'en est pas de même sur le sujet du comportement à rupture, comme cela a été discuté dans différents travaux [Carassou 2000, Pesci 2004].

### I.1.3. Cristallographie

Les cartographies EBSD réalisées par Mathieu et Novaha *et al.* [Novaha *et al.* 2003, Mathieu 2006] montrent que les aciers de cuve ne présentent pas de texture cristallographique marquée à l'échelle macroscopique. Ceci est en accord avec les traitements qu'il a subis.

Par contre, à une échelle plus fine, les orientations entre lattes de ferrite, issues d'un même grain d'austénite ne sont pas aléatoires. Pour comprendre ces relations d'orientations, il faut revenir à la croissance de la bainite à partir de l'austénite. De nombreux travaux ont été réalisés pour définir les relations entre les lattes de ferrite  $\alpha$  et l'austénite mère  $\gamma$  [Bhadeshia 2000]. Les relations de Kurdjumov-Sachs (K-S) et celle de Nishiyama-Wassermann (N-W) sont les plus couramment observées, elles sont définies par l'équation I.1 :

$$\left\{ \begin{array}{l} (111)_{\gamma} // (101)_{\alpha} \\ \text{angle } \theta \text{ entre } [1\bar{1}0]_{\gamma} \text{ et } [11\bar{1}]_{\alpha} \\ \text{angle } 5,26^{\circ} - \theta \text{ entre } [1\bar{2}1]_{\gamma} \text{ et } [10\bar{1}]_{\alpha} \\ \text{avec } \theta = 0^{\circ} : K - S \text{ ou } \theta = 5,26^{\circ} : N - W \end{array} \right. \quad \text{Équation I.1}$$



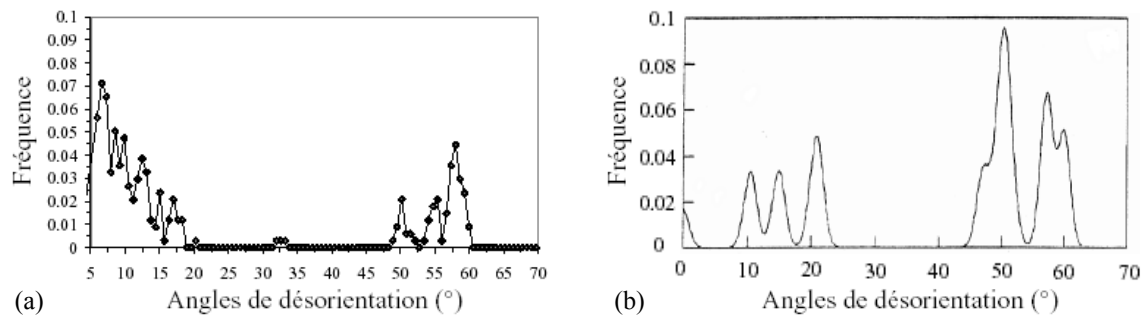


Figure I.8. Comparaison entre (a) la distribution des angles de désorientation entre lattes de ferrite des aciers de cuve, issues d'un même grain d'austénite [Haušild 2002], et (b) la distribution théorique calculée à l'aide de la relation K-S [Gourgues *et al.* 2000].

Partant d'une cartographie d'orientation par EBSD des aciers de cuve, Haušild [Haušild 2002] a déterminé une distribution des angles de désorientation entre lattes de ferrite, issues d'un même grain d'austénite. Il compare ensuite l'histogramme expérimental à la distribution théorique calculée par Gourgues *et al.* [Gourgues *et al.* 2000] en partant des relations d'orientation N-W et K-S. La comparaison de ces deux distributions est donnée en figure I.9. Haušild conclue que la distribution calculée grâce à la relation K-S est en meilleur accord avec celle expérimentale. De cette étude, on retiendra que la répartition des angles de désorientation est bimodale (que ce soit concernant la distribution théorique ou celle expérimentale), avec d'un coté des lattes très désorientées entre elles de l'ordre de 50° à 60°, et de l'autre des lattes d'orientation plus proches avec moins de 20° de désorientation.

#### I.1.4. Microstructure des dislocations

Peu de travaux sont disponibles sur les dislocations dans les aciers de cuve, notamment à cause de la difficulté de réaliser des observations au MET dans le fer. Il faut souligner les travaux réalisés par Karlik *et al.* [Karlik 2001, 2002], et Robertson *et al.* [Robertson *et al.* 2007]. Comme le montre la figure I.10.a, la densité de dislocations à l'intérieur des lattes de ferrite apparaît souvent être grande. La densité de dislocations initiale est estimée aux alentours de  $10^{14} \text{ m}^{-2}$  [Karlik 2002], ce qui est également l'ordre de grandeur des densités observées dans d'autres aciers bainitiques [Bhadeshia 2000]. Parfois les dislocations semblent présenter un arrangement en réseau carré, comme le montre la figure I.10.b. Cependant il n'est pas certain que cette structure de dislocations ne soit pas un mur de dislocations constituant la frontière entre deux lattes de ferrite. Enfin, il n'existe pas d'indexation des systèmes de glissement dans la ferrite des aciers de cuve, que ce soit à l'état initial ou à l'état déformé. Robertson *et al.* rapporte [Robertson *et al.* 2007] à ce sujet, que l'identification des plans de glissement ne peut pas non plus être réalisée par l'étude des traces macroscopiques de glissement, ces dernières

étant trop sinueuses.

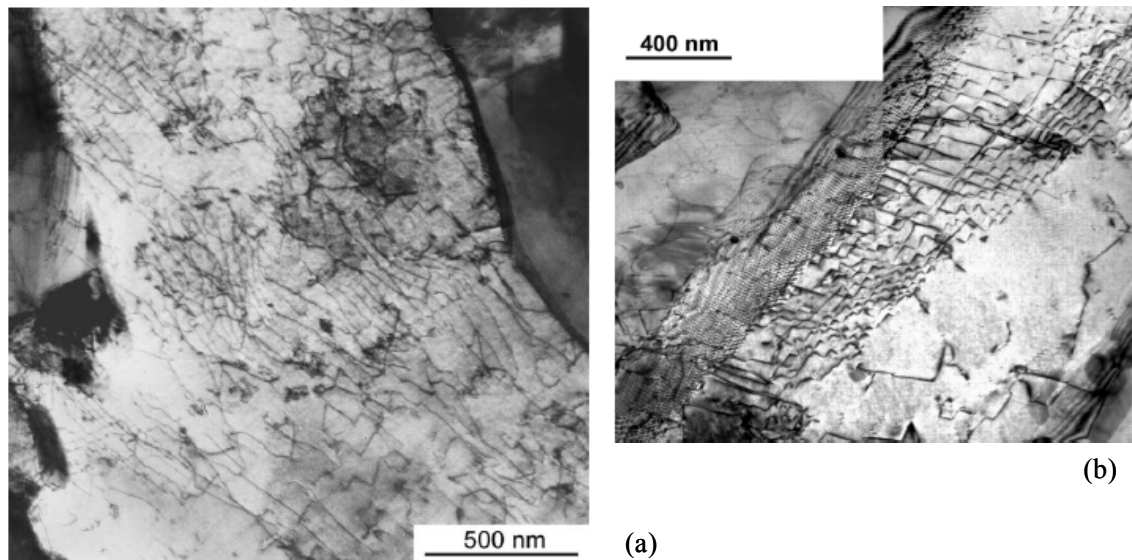


Figure I.9. Microstructures de dislocations observées au MET, (a) à l'intérieur d'une latte [Karlik *et al.* 2003], (b) microstructure interprétée comme un réseau carré [Karlik, 2002].

## Résumé

La microstructure majoritaire des aciers de cuve est du type bainite revenue, avec d'une part de la bainite contenant peu de carbures et d'autre part des îlots de bainite de taille plus petite et comportant des amas de carbures.

Les anciens grains d'austénite ont une taille de l'ordre de 30  $\mu\text{m}$ . Les paquets de lattes de ferrite sont équiaxes et d'une taille comprise entre 10 et 25  $\mu\text{m}$ , les lattes individuelles sont d'une longueur de 10  $\mu\text{m}$  et d'une section de 1 à 2  $\mu\text{m}$ . Les lattes d'un même paquet sont désorientées de quelques degrés ce qui laisse à penser qu'elles sont séparées par des murs de dislocations. La répartition des angles de désorientation entre deux paquets de ferrite issus d'un même grain d'austénite est bimodale, avec d'un côté des angles de moins de 20°, et de l'autre des plus fortes désorientations aux alentours de 60°.

La plus grande quantité de carbures se trouvent sous forme d'agglomérats. Cependant les lattes de ferrite contiennent également une dispersion de carbures non négligeable. Ces derniers se présentent sous forme de sphères de 0,1  $\mu\text{m}$  ou légèrement allongés à l'intérieur des lattes. Les plus gros peuvent atteindre 1  $\mu\text{m}$  sous forme de plaques entre les paquets ou dans les agglomérats.

Aucune texture cristallographique n'a été observée à l'échelle macroscopique.

Une grande densité de dislocations est présente au sein des lattes de ferrite. Celle-ci est estimée de l'ordre de  $10^{14} \text{ m}^{-2}$ .

---

## **I.2. Etude bibliographique du comportement mécanique des monocristaux de fer**

Nous avons montré que le comportement plastique des aciers de cuve est lié à celui de la ferrite. C'est pourquoi dans la partie qui suit, on va chercher à définir les principales caractéristiques du comportement plastique du monocristal de fer. L'intérêt est double, d'une part pour définir certaines données d'entrée, qui seront nécessaires aux simulations, telles que la nature du glissement dans le fer. D'autre part, pour définir des propriétés caractéristiques du comportement du fer, que la future loi de comportement doit permettre de retrouver. Cette étude bibliographique se focalise sur le comportement athermique, et assurera le lien avec la température de fonctionnement des cuves de 300 °C, puisque la majorité des expériences a été réalisée à l'ambiante.

L'essentiel de la littérature porte sur des monocristaux déformés en traction, et à première vue, les résultats observés sont souvent contrastés voire parfois contradictoires. Ce désaccord apparent peut aujourd'hui s'expliquer par l'influence significative de certains paramètres qui vont servir de lignes conductrices à cette partie : après avoir évoqué les systèmes de glissement observés, nous évoquerons l'influence de la température, puis la dépendance en orientation. Un lien sera établi, quand cela est possible, entre les observations macroscopiques et les propriétés élémentaires des dislocations ou leurs interactions.

### **I.2.1. Les systèmes de glissement observés**

La question des systèmes de glissement dans les matériaux cubiques centrés, et notamment le fer, a longtemps fait couler beaucoup d'encre. La direction de glissement est toujours observée comme une direction dense  $\langle 111 \rangle$  de la structure CC. Il existe par contre dans la littérature trois différents points de vue majeurs au sujet des plans de glissement.

Les premières études qui ont porté sur les monocristaux de fer, ont d'abord suggéré que le glissement se produit sur des plans  $\{110\}$ ,  $\{112\}$  ainsi que  $\{123\}$ , qui sont en zone avec la direction de glissement  $\langle 111 \rangle$  [Cox, 1956, Bilger, 1966]. D'autres auteurs ont ensuite suggéré que le glissement n'avait pas lieu sur des plans de bas indices, mais se produisait sur des plans proches du plan de cission critique maximum [Vogel, 1953]. Cette théorie est souvent appelée glissement non cristallographique. Ces deux idées du glissement dans le fer, sont essentiellement basées sur l'observation des traces macroscopiques de glissement. Mais comme le montre la figure I.10, les projections des différents plans envisagés pour le glissement suivant la direction de glissement sont assez proches. Les plans les plus proches des familles  $\{112\}$  et  $\{123\}$  ne sont séparés que de 10°. Il est donc clair que la proximité et la multiplicité des plans

envisagés rend les interprétations des lignes de glissement assez délicates. En outre, elles sont souvent très sinueuses et ramifiées. Ce constat a, par conséquent, donné naissance à une troisième position selon laquelle les traces de glissement macroscopiques, qui à première vue coïncident avec un plan  $\{123\}$  ou non cristallographique, sont en fait composés de courts glissements sur des plans de la famille  $\{110\}$  (cf. également  $\{112\}$ ) [Steijn et Brick 1953, Low et Turkalo 1961, Taoka *et al.* 1964, Takeuchi *et al.* 1967, Keh 1964, Franciosi 1983].

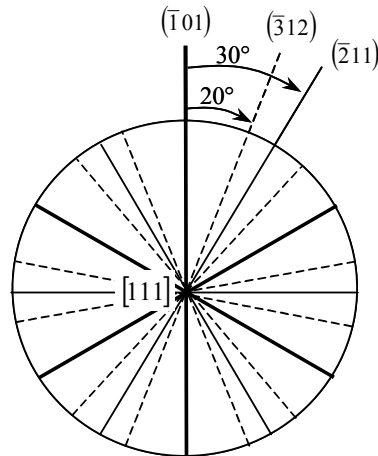


Figure I.10. Projection des plans  $\{110\}$ ,  $\{112\}$  ainsi que  $\{123\}$  suivant l'axe  $[111]$ .

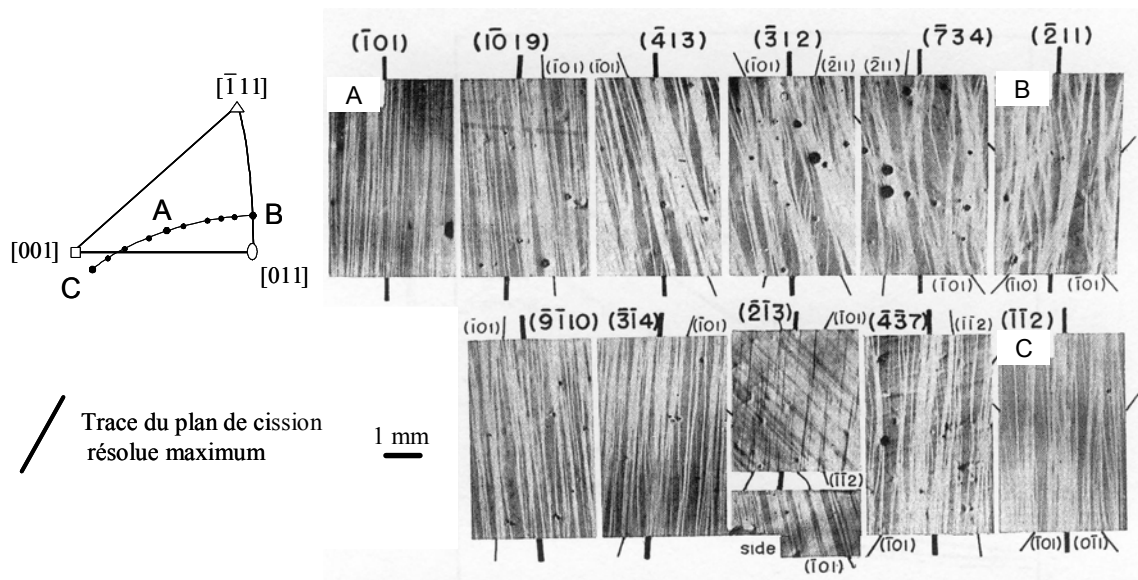


Figure I.11. Lignes de glissement macroscopiques observées après quelques pourcents de déformation suivant différentes orientations [Taoka *et al.* 1964]

Dans la majorité des travaux réalisés après 1970, cette dernière opinion semble s'imposer. Les systèmes de plans  $\{110\}$  sont systématiquement observés et suivent ensuite les systèmes

{112}. La figure I.11 montre les lignes macroscopiques de glissement observées dans du fer-3 % Si par Taoka *et al.* [Taoka *et al.* 1964]. Ces lignes bien que relativement sinueuses, peuvent être décomposées en deux orientations distinctes, qui correspondent bien aux traces des plans {110} et d'un plan voisin de la famille {112}. Nous reviendrons sur la dépendance en orientation par la suite. Les indexations des systèmes de glissement au MET sont peu nombreuses, mais les conclusions sont similaires. Les observations réalisées par Keh dans le fer pur, montrent clairement la présence des deux familles {110} et {112} [Keh 1964]. Ces plans ont également été identifiés dans des alliages de fer avec quelques pourcents de silicium par Takeuchi *et al.* et Low *et al.* (seulement les systèmes {110}) [Takeuchi *et al.* 1967, Low et Turkalo 1961]. Enfin, il est intéressant de noter que les études géométriques de la structure CC, qui assimilent les atomes à des sphères dures, conduisent également à la conclusion que le glissement est possible sur les plans {110} et {112}, alors qu'il ne l'est pas sur les plans {123} [Van Der Walt, 1969, Steijn et Brick 1953].

## **I.2.2. La dépendance en orientation**

### **L'influence sur les courbes de déformation**

La dépendance du comportement du fer en fonction de la direction de chargement a très largement été traitée dans la littérature [Keh, 1964, Jaoul, 1960, Steijn, 1953, Spitzig, 1970a]. Il a été mis en évidence l'existence de deux types de comportement singulièrement différents, ce que l'on retrouve également dans le comportement des monocristaux de structure Cubique à Faces Centrées (CFC) dans le régime athermique. La figure I.12 regroupe plusieurs courbes de déformation obtenues dans le fer pur à température ambiante par Spitzig et Keh, et Keh et Nakada [Spitzig et Keh 1970a, Keh et Nakada 1967].

D'une part, pour la majeure partie des directions de chargement qui se trouvent à l'intérieur du triangle standard, on retrouve les courbes à trois stades bien connues des matériaux CFC (les courbes A, B et C de la figure I.12). Néanmoins, il faut préciser que la définition de ces courbes requiert un certain nombre de traitements à partir des données brutes des essais de traction, et en particulier la correction nécessaire à la rotation de l'axe de sollicitation (*cf.* [Jaoul et Gonzalez 1960]). On notera que les informations relatives à ces corrections sont rarement fournies. La description qui suit reprend les interprétations théoriques associées à ce type de courbes, différentes revues sont disponibles dans la littérature pour plus de détails à ce sujet [Rollet et Kocks 1994, Sevillano 1993, Kocks et Mecking 2003].

- Durant le premier stade dit de glissement facile qui peut s'étendre jusque 30 % de glissement, un seul système est actif et il interagit principalement avec lui même pour former des structures dipolaires. Les densités de dislocations sur les autres

systèmes restent petites devant la densité sur le système primaire. Cette interaction dipolaire est relativement faible et conduit à peu de stockage de dislocations, comme nous le verrons au chapitre III. L'écroutissage est linéaire et assez faible généralement compris entre  $\mu/1000$  à  $\mu/2000$  (avec  $\mu$  le module de cisaillement) sur l'ensemble des travaux consultés.

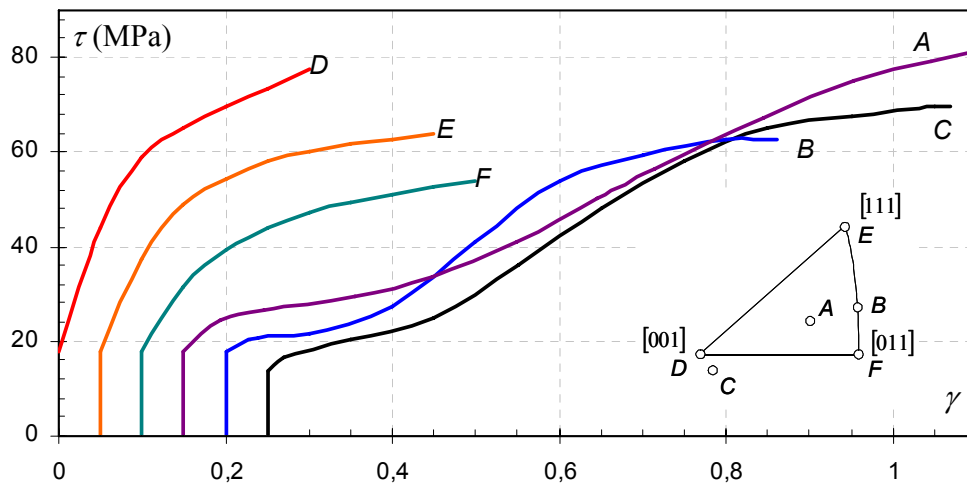


Figure I.12. Différentes courbes de déformation en fonction de l'orientation, d'après Spitzig et Keh, et Keh et Nakada [Spitzig et Keh 1970a, Keh et Nakada 1967].

- Suit ensuite un second stade d'écroutissage linéaire de pente plus élevée entre  $\mu/400$  à  $\mu/800$ , qui correspond à l'activation d'un second système de glissement. L'interaction entre les deux systèmes peut conduire à la formation de jonctions qui ancrent alors plus ou moins fortement les dislocations et augmentent la densité de dislocations immobiles.
- Enfin l'écroutissage sature dans le troisième stade parabolique, la restauration dynamique devient importante et finit par équilibrer l'accumulation des dislocations en fin de stade III. La restauration dynamique fait intervenir un certain nombre de mécanismes qui réduisent les contraintes internes, et diminuent la densité de dislocations immobilisées. Le principal mécanisme demeure l'annihilation assistée thermiquement par le glissement dévié des dislocations vis. Ce dernier stade est donc dépendant de la température et de la vitesse de sollicitation, contrairement aux deux précédents.

D'autre part, pour des chargements proches des orientations de haute symétrie, telles que [001], [011] et [111], les courbes cission-glissement sont pseudo-paraboliques (les courbes D, E et F de la figure I.12). Le glissement opère sur plusieurs systèmes [Jaoul et Gonzales 1960, Keh 1964] dès le début de la déformation plastique, ce qui est synonyme d'un écrouissage très

important. La comparaison des trois courbes  $D$ ,  $E$  et  $F$  conduit à une hiérarchisation de l'écroutissage entre les orientations de haute symétrie. Ainsi le durcissement est décroissant pour les chargements suivant l'ordre  $[001]$ ,  $[011]$  et  $[111]$ . Cette hiérarchie, a également été constatée par d'autres auteurs [Keh 1964, Jaoul et Gonzalez 1960], dépend du nombre de systèmes mis en jeu [Franciosi 1984].

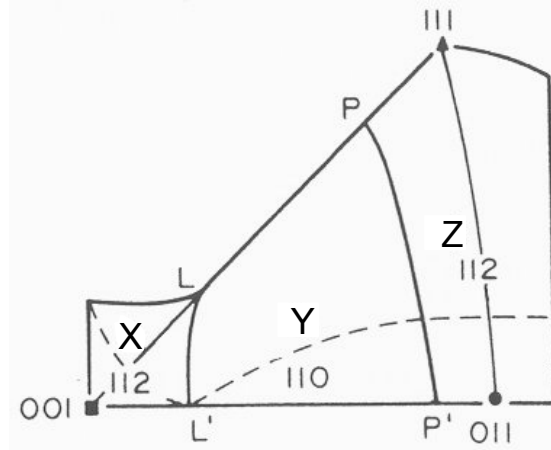


Figure I.13. Domaines d'activation des systèmes de plans  $\{110\}$  et  $\{112\}$  dans le triangle standard [Franciosi 1983] dans l'hypothèse d'égalité des cisssions critiques de chaque famille.

Le glissement des systèmes  $\{112\}$  présente la particularité d'être asymétrique, c'est à dire qu'il existe un sens de glissement facile, dit de maclage, et un sens difficile ou d'antimaclage. L'analyse des lignes de glissements de la figure I.11 pour les orientations  $A$ ,  $B$  et  $C$ , montrent que les glissements simples ont lieu sur des plans différents  $\{110\}$  pour l'orientation  $E$  et  $\{112\}$  dans les sens maclage et antimaclage correspondant respectivement aux orientations  $C$  et  $B$ . L'activation des différentes familles de systèmes dépend donc de l'orientation. Toutefois, l'interprétation des traces de glissement concernant l'orientation  $B$  n'est pas aussi évidente que celles relatives aux deux autres directions. Elles apparaissant nettement plus sinueuses et ramifiées.

Franciosi *et al.* [Franciosi *et al.* 1983] ont défini dans le triangle standard les zones d'activation pour les familles de plans  $\{110\}$  et  $\{112\}$  (voir figure I.13). Pour cela, ils ont procédé à la comparaison des facteurs de Schmid des deux familles de plans, et ceci en supposant que les contraintes critiques sur chacune d'elles sont équivalentes. Ces auteurs montrent ainsi l'existence de trois domaines d'activation: le domaine  $Y$ , qui est le plus étendu, correspond à l'activation d'un système de plan  $\{110\}$ , et les domaines  $X$  et  $Z$  coïncident avec les zones d'activation d'un système  $\{112\}$ . Le domaine  $X$  coïncide avec l'activation d'un système  $\{112\}$  dans le sens facile, et le domaine  $Z$  dans le sens difficile. Les directions de chargement particulières qui se situent sur la frontière entre  $n$  domaines d'activation différents équivaut à

l'activation simultanée de  $n$  systèmes, comme cela était déjà le cas avec une seule famille de plans de glissement. Par exemple, un chargement sur  $LP$  conduit à l'activation de deux systèmes de la famille de plans  $\{110\}$ , un chargement suivant les frontières  $LL'$  ou  $PP'$  induit l'activation de deux systèmes de natures différentes  $\{110\}$  et  $\{112\}$ .

Ces mêmes auteurs ont également réalisé des essais de traction pour vérifier la position de ces trois domaines et des frontières mixtes les séparant ( $LL'$  et  $PP'$ ). Franciosi indique avoir vérifié l'existence de certaines de ces frontières au travers de l'observation des traces de glissement. La seule exception a été obtenue pour un chargement proche de la frontière  $PP'$ . Le double glissement mixte sur les systèmes  $\{110\}$  et  $\{112\}$  attendu, n'a pas été observé au profit d'un glissement simple sur un système  $\{110\}$ .

### L'asymétrie des systèmes $\{112\}$

Comme le suggère la comparaison des courbes  $A$  et  $B$  de la figure I.12, la cission critique pour les systèmes  $\{112\}$  dans le sens de maclage est supérieure à celle des systèmes  $\{110\}$ . Cette différence a également été relevée par d'autres auteurs [Nine 1970, Takeuchi *et al.* 1967, Taoka *et al.* 1964, Spitzig et Keh 1970b, Franciosi *et al.* 1983]. Le tableau I.2 propose une synthèse des ratios  $\tau_0^{\{112\}}/\tau_0^{\{110\}}$  des cissions critiques des systèmes  $\{112\}$  et  $\{110\}$ , obtenues dans la littérature. Il est à noter que les travaux de Takeuchi *et al.* et Taoka *et al.* portent sur des alliages de fer et respectivement 4,4 % et 3 % de silicium. Dans la majorité des études la contrainte critique sur les plans  $\{110\}$  est observée comme la plus faible, et elle ne diffère de celle des plans  $\{112\}$  dans le sens facile que de l'ordre de 10 %, différence qui est généralement négligée. Le glissement des plans  $\{112\}$  dans le sens d'antimaclage est toujours le plus dur de l'ordre de 15 %.

Tableau I.2. Ratios des cissions critiques des deux familles  $\tau_0^{\{112\}}/\tau_0^{\{110\}}$  obtenus dans la littérature.

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

Opinsky *et al.* [Opinsky, 1951] ont étudié les zones d'activation pour les trois familles  $\{110\}$ ,  $\{112\}$  ainsi que  $\{123\}$ , à partir de la comparaison des facteurs de Schmid respectifs de ces systèmes. Ces mêmes auteurs ont également fait varier le ratio entre les différentes cissions critiques des familles de glissement, respectivement  $\tau_c^{\{110\}}$  et  $\tau_c^{\{112\}}$ . Ils montrent alors que les



systèmes  $\{110\}$  peuvent être seuls activables si  $\tau_c^{\{112\}} > 1,15 \tau_c^{\{110\}}$ . Or les valeurs expérimentales de  $\tau_c^{\{112\}}/\tau_c^{\{110\}}$  sont de cet ordre de valeur pour les systèmes  $\{112\}$  dans le sens difficile. Franciosi déduit d'ailleurs de ces valeurs que le domaine d'activation  $Z$  est assez réduit. Franciosi suggère également que la différence entre les cissions critiques des systèmes  $\{112\}$  et  $\{110\}$  peut être augmentée par la présence d'éléments d'alliages et notamment le carbone, les systèmes  $\{112\}$  étant plus affectés par la présence d'éléments interstitiels que les  $\{110\}$ . En revanche, les résultats obtenus par Takeuchi *et al.* [Takeuchi *et al.* 1967] et Spitzig et Keh [Spitzig et Keh 1970b] sont surprenant, les rapports  $\tau_c^{\{112\}}/\tau_c^{\{110\}}$  qu'ils obtiennent sont bien supérieurs à 1,15. Dans ces conditions, le chargement suivant la frontière  $[011] - [111]$  devait donner lieu à un glissement double selon deux systèmes de plans  $\{110\}$ . Une explication possible peut provenir des incertitudes expérimentales sur les mesures des contraintes.

### **Influence de l'orientation sur les courbes à trois stades**

Outre la sélection de la nature et du nombre de système de glissement, la direction de chargement affecte également l'allure des courbes à trois stades comme l'ont montré un certain nombre d'études sur le sujet [Taoka *et al.* 1964, Spitzig et Keh 1970a, Franciosi 1984, Kumagai *et al.* 1990a]. Il s'agit d'un effet important à comprendre dans la mesure où le taux d'écrouissage ou encore la longueur des stades sont modifiés. C'est pourquoi, les études correspondantes sont détaillées dans ce qui suit. Néanmoins, Il existe assez peu d'études méthodiques dans la mesure où elles nécessitent un repérage systématique de la direction de chargement dans le triangle standard par deux angles ( $\chi$ ,  $\varphi$ ), qui sont définis en figure I.14. D'une part,  $\chi$  est l'angle entre le plan de cission résolue maximale et le plan  $(\bar{1}01)$ . D'autre part,  $\varphi$  est introduit comme l'angle entre la direction de traction et la frontière  $[001]-[011]$ . La plupart de ces travaux concernent les systèmes  $\{110\}$ . L'effet de l'angle  $\chi$  a été un peu plus discuté [Taoka *et al.* 1964, Spitzig et Keh 1970a, Franciosi 1984, Kumagai *et al.* 1990a] en comparaison avec l'angle  $\varphi$  [Keh et Nakada 1967, Kumagai *et al.* 1990a].

Comme le montrent les résultats obtenus par Kumagai *et al.* [Kumagai *et al.* 1990a] donnés en figure I.15, la longueur du stade I augmente avec l'angle  $\varphi$ , alors que le taux d'écrouissage du stade II diminue. Le taux d'écrouissage est abaissé de  $\mu/600$  (courbe A) à  $\mu/1000$  (courbe C). Les résultats obtenus par Keh et Nakada sont similaires [Keh et Nakada 1967]. L'allongement du stade I avec  $\varphi$ , est souvent expliqué par la rotation de la direction de chargement avec la déformation plastique.

Jaoul et Gonzalez [Jaoul et Gonzalez 1960] ainsi que Keh [Keh 1964] ont repéré lors de leurs essais de traction, les orientations initiales et finales de la direction de chargement. Une synthèse de leurs résultats est proposée dans le triangle standard en figure I.16, dans lequel les

domaines d'activation des systèmes  $\{112\}$  ne sont pas représentés pour plus de clarté. Dans les conditions de glissement simple selon un plan  $\{110\}$ , la direction de chargement tourne vers la direction de glissement, qui est celle  $[111]$  dans l'exemple de la figure. Lorsque la frontière  $[001]$ - $[011]$  est atteinte, l'activation du second système devrait en théorie tourner le chargement vers l'axe  $[011]$ . Or ceci n'est pas toujours le cas, la direction de chargement dépassant amplement la frontière (ou overshoot) de parfois près de  $10^\circ$  [Jaoul et Gonzalez 1960, Keh 1964, Kumagai *et al.* 1990a]. La raison de ces dépassements n'est pas encore bien comprise.

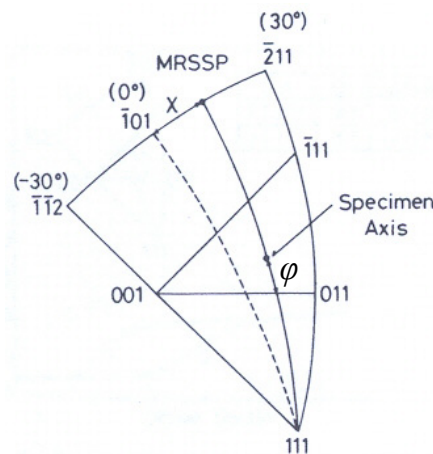


Figure I.14. La direction de traction est repérée dans le triangle standard par les angles  $(\chi, \varphi)$  [Kumagai *et al.* 1990a]

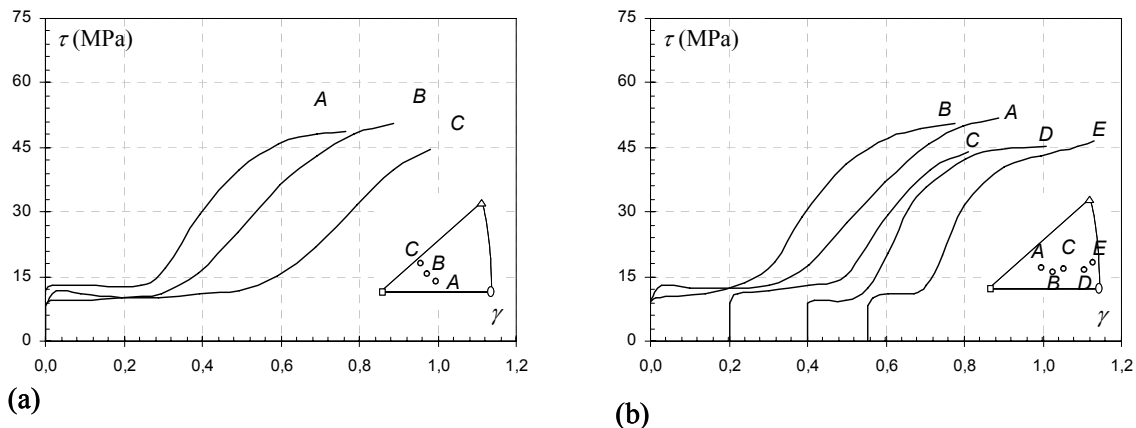


Figure I.15. Influence de l'orientation du chargement sur les courbes cisssion résolue – glissement en condition de glissement simple sur un système  $\{110\}$ , (a) effet de l'angle  $\varphi$ , (b) effet de l'angle  $\chi$ , d'après [Kumagai, 1990a]. Ces courbes ont été obtenues à 333 K.

La figure I.16 est aussi l'occasion de présenter d'autres observations. Un chargement suivant la frontière  $[1\bar{1}1]$ -  $[011]$ , est tourné vers la direction  $[011]$ . Et les directions de la frontière

[001]-[011], suivant l'axe [011]. Enfin, Jaoul et Gonzalez sont les seuls à avoir montré la rotation d'un chargement proche de [001] vers  $[\bar{1}\bar{1}1]$ , qui correspondrait au glissement simple suivant un plan {112}.

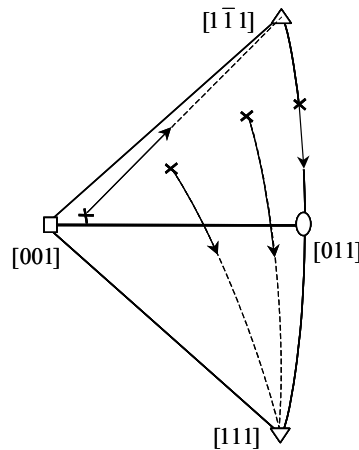


Figure I.16. Rotation de l'axe de traction avec la déformation plastique, en fonction de l'orientation initiale, d'après [Jaoul et Gonzalez 1960, Keh 1964]

Concernant l'angle  $\chi$ , Kumagai *et al.* [Kumagai *et al.* 1990a] ont obtenu également que son augmentation réduit la longueur du stade I et le taux d'écroutissage du stade II est accru (voir figure I.15.b). Ainsi le taux d'écroutissage passe de  $\mu/800$  pour l'orientation A de la figure I.15, à  $\mu/400$  (courbe C). Ces résultats originaux ne peuvent malheureusement être comparés à aucune autre étude, car la majorité des travaux existant font varier  $\chi$  et  $\varphi$  simultanément, empêchant toute conclusion sur le rôle de  $\varphi$  seul. Les explications tant sur l'évolution du stade I que sur le taux d'écroutissage du stade II proposées par Kumagai *et al.* ne semblent pas totalement convaincantes.

### I.2.3. Influence de la température

Le comportement des monocristaux de fer est très dépendant de la température. Elle joue sur plusieurs aspects comme favoriser l'activation de certains plans ou modifier les caractéristiques des courbes de déformation.

Keh et Nakada [Keh et Nakada 1968] ont réalisé des essais de traction sur des monocristaux de fer dans les conditions de glissement simple et pour différentes températures. Ils ont ainsi obtenu la dépendance de la cission critique pour différentes orientations en fonction de température, qui est présentée en figure I.17 a. Ces deux courbes présentent la même allure qui est décrite par deux régimes différents. D'une part un régime thermique, dans lequel les cissions

critiques augmentent très fortement avec l'abaissement de température. Et d'autre part, un plateau athermique pour lequel la faible diminution des cissions critiques ne dépend que de la baisse du module de cisaillement avec la hausse de température. La température de transition entre ces deux régimes est généralement admise comme proche de la température ambiante dans le cas du fer. Il est intéressant de noter que l'écart entre la cission critique des systèmes  $\{110\}$  (orientation  $A$ ) et celle des systèmes  $\{112\}$  (orientation  $C$ ) se creuse avec la diminution de la température, ce qui explique que les systèmes  $\{110\}$  sont plus largement observés à basse température [Taoka *et al.* 1964]. Une remarque est toutefois nécessaire concernant l'obtention des courbes reportées en figure I.17.a. A basse température, le début des courbes de déformation présente un régime de microplasticité, ou stade 0, pour lequel, seules les dislocations coins sont mobiles. Or à basse température, la plasticité est contrôlée par la mobilité des vis [Kubin 1980]. De ce fait, la limite conventionnelle, peut être relativement éloignée de la véritable contrainte critique, comme le démontrent les travaux récents de Naamane et ses collaborateurs [Naamane *et al.* 2007].

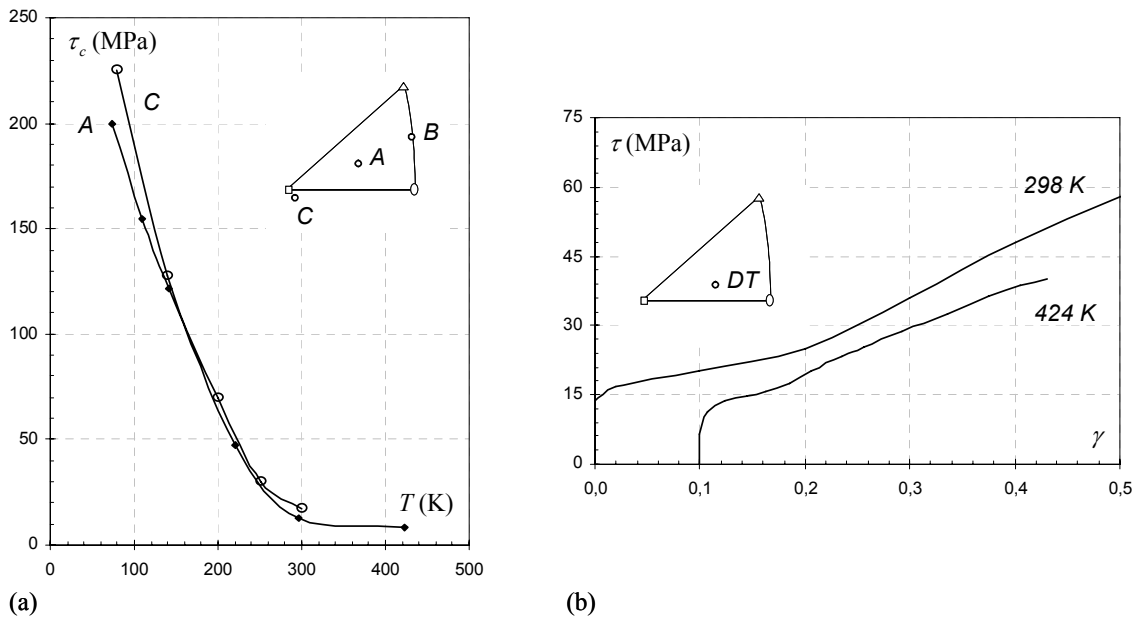


Figure I.17. Effet de la température sur (a) les cissions critiques des systèmes  $\{110\}$  et  $\{112\}$  dans le sens de maclage, d'après [Spitzig et Keh 1970a, Keh et Nakada 1968], et (b) sur l'allure des courbes de déformation pour des cristaux orientés pour du glissement simple sur les systèmes  $\{110\}$  [Keh et Nakada 1968, Spitzig et Keh 1970a].

Focalisons nous sur le régime athermique. Les travaux de Keh et Nakada [Keh et Nakada 1968] ont également montré que les courbes de déformation correspondant aux glissements simples des plans  $\{110\}$  demeurent des courbes à trois stades pour des températures supérieures

à la température de transition (*cf.* figure I.17.b). La longueur des deux premiers stades diminue au profit du troisième stade parabolique, à cause de l'augmentation de la restauration dynamique. Des résultats similaires ont aussi été obtenus par d'autres auteurs, par exemple Quesnel *et al.* [Quesnel *et al.* 1974], Spitzig [Spitzig 1972] et Kuramoto *et al.* [Kuramoto *et al.* 1979] pour des monocristaux orientés en glissement simple suivant un système  $\{110\}$ , ainsi que Spitzig concernant les systèmes  $\{112\}$  [Spitzig 1972]. Il faut noter également les résultats contradictoires obtenus par Kumagai *et al.* [Kumagai *et al.* 1990b], pour des cristaux orientés en glissement simple suivant un plan  $\{110\}$ . Ils obtiennent également des courbes de déformation à trois stades pour des températures balayant de l'ambiante à 373 K. Mais ces auteurs constatent une variation différente du stade I qui est allongé avec l'augmentation de la température de l'essai.

#### **I.2.4. Le glissement dévié**

Le Glissement Dévié (GD) est le changement de plan que peut réaliser une dislocation vis. Ce mécanisme est important à prendre en compte dans le cas des CC puisqu'il est visible dès le début de la déformation. Mais peu d'informations sont disponibles. Comme l'illustre les observations des lignes de glissement sinueuses et ramifiées [Taoka *et al.* 1964, Franciosi 1984], le glissement dévié est généralement admis comme facile dans les matériaux de structure CC et notamment le fer. En effet, pour une dislocation vis initialement dans un plan  $\{110\}$ , deux plans  $\{110\}$  et trois plans  $\{112\}$  sont théoriquement possibles pour la déviation [Van Der Walt 1969].

La structure de cœur des dislocations vis a longtemps été sujette à débat. Les premières études atomiques sur les matériaux CC [Duesbery *et al.* 1973, Vitek 1974] ont défini un cœur dégénéré suivant les trois plans  $\{110\}$ . Cette structure donne lieu à un non respect de la loi de Schmid [Bassani *et al.* 2001, Vitek *et al.* 2004], qui est en contradiction avec les observations expérimentales des traces de glissement (*cf.* figure I.11). Les simulations récentes par Ab Initio sur le fer [Frederiksen et Jacobsen 2003] démontrent que la structure de cœur des vis est en fait compacte. Cette structure est dorénavant reproduite dans les études par Dynamique Moléculaire (DM) [Domain et Monnet 2005, Chaussidon *et al.* 2006].

Il est intéressant de noter les travaux réalisés par Cai et ses collaborateurs [Cai *et al.* 2001] par Monte Carlo cinétique sur le glissement dévié dans le molybdène. Ils montrent ainsi que dans l'hypothèse d'un glissement dévié très aisé, la déviation induit la formation de nombreux super-crans et boucles débris. Leur présence le long de la ligne des dislocations restreint significativement la mobilité de ces dernières. Enfin, quelques auteurs ont proposé d'appliquer les modèles stochastiques de déviation des matériaux CFC [Escaig 1968] au cas des CC. Mais la structure de cœur des dislocations est différente, et le mécanisme mis en jeu est propre à ces

matériaux.

Finalement certaines questions restent ouvertes. On mentionnera en particulier les paramètres qui interviennent dans les critères de déviation et sur le choix du plan de déviation parmi les plans  $\{110\}$  et  $\{112\}$  possibles. Un critère de déviation simplifié sera proposé dans le chapitre suivant.

### **I.2.5. Comparaison avec le comportement des CFC**

Les points développés au cours de ce chapitre suggèrent qu'il existe un certain nombre de similitudes entre le comportement plastique des matériaux de structure CFC et le fer dans le régime athermique (voir aussi [Šesták et Seeger 1971]). Des revues sont disponibles dans [Mitchell 1964, Takeuchi 1975] concernant le comportement des matériaux de structure CFC.

- En premier lieu, la nature de la déformation plastique est identique, elle s'opère par glissement sur des plans de glissement qui sont assez bien établis soit par l'observation des traces macroscopiques, soit par identification au MET [Taoka *et al.* 1964, Keh 1964]. Dans ces deux structures, les dislocations vis ont également la faculté de changer de plans. Le GD est en revanche plus difficile dans le cas des matériaux CFC, car il n'existe qu'un seul plan pour la déviation. En outre, le changement de plan nécessite la recombinaison préalable des partielles, mécanisme qui a un certain coût énergétique.
- Puisque les mécanismes élémentaires sont semblables, le comportement plastique qui en découle l'est aussi. Ainsi, on retrouve dans le cas du fer, l'influence de la direction de sollicitation qui affecte les courbes de déformation, qui sont soit pseudo-paraboliques soit décomposées en trois stades. Le taux d'écroutissage du stade I est plus fort dans le cas du fer, entre  $\mu/1000$  et  $\mu/2000$ , à comparer à  $\mu/3000$  dans les CFC. Tandis que cette hiérarchie est inversée au sujet du stade II, le taux d'écroutissage des CFC de l'ordre  $\mu/300$ , est plus fort.

Toutefois, le cas du fer reste plus complexe et certains points sont encore mal compris. L'existence d'une famille de glissement supplémentaire en comparaison des matériaux CFC introduits de nouvelles situations comme l'existence d'un domaine d'activation relatif aux systèmes  $\{112\}$ , ou le rôle nouveau joué par la température qui favorise ou non l'activation d'une famille. Le phénomène d'overshoot de la direction a également été observé dans des matériaux CFC, il est cependant moins marqué.

## Résumé

La majorité des observations expérimentales portant sur le fer dans le régime athermique convergent à présent vers un glissement cristallographie de direction  $\langle 111 \rangle$  et sur des plans  $\{110\}$  ainsi que  $\{112\}$ .

Il est possible de regrouper les courbes de déformation obtenues lors de la traction de monocristaux en deux familles différentes, en fonction de l'activité plastique. D'un côté les courbes pseudo-paraboliques, correspondent à l'activation simultanée de plusieurs systèmes de glissement. D'autre part, les courbes bien connues à trois stades qui sont typiques d'une orientation initiale en glissement simple.

La température affecte peu le comportement du fer, dans le régime qui nous intéresse.

L'orientation du cristal par rapport au chargement modifie le comportement du fer. Elle définit le nombre de systèmes et le(s) plan(s) de glissement parmi les familles  $\{110\}$ , et  $\{112\}$ . D'autre part l'orientation affecte les propriétés des différents stades des courbes de déformation en glissement simple.

Le glissement dévié est admis comme relativement facile, mais il existe très peu d'informations à son sujet.

---

## Bibliographie

- [Bassani *et al.* 2001] J. L. Bassani, K. Ito, V. Vitek, *Mat. Sci. Eng.* **A319-321**, 97 (2001).
- [Bhadeshia 2000] H. K. D. H. Bhadeshia dans “Bainite in steel”, IOM communications Ltd. (2001).
- [Bhadeshia et Christian 2002] H. K. D. H. Bhadeshia, J. W. Christian, *Metall. Trans. A* **21**, 767 (1990).
- [Bilger 1966] H. Bilger, *Phys. Stat. Sol.* **18**, 637 (1966).
- [Cai *et al.* 2001] W. Cai, V. V. Bulatov, S. Yip, A. S. Argon, *Mat. Sci. Eng.* **A309-310**, 270 (2001).
- [Carassou 2000] S. Carassou, Thèse de doctorat de l’Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris (2000).
- [Chaussidon *et al.* 2006] J. Chaussidon, M. Fivel, D. Rodney, *Acta Mater.* **54**, 3407 (2006).
- [Cox *et al.* 1956] J. J. Cox, G. T. Horne, R. F. Mehl, *Trans ASM* **49**, 118 (1956).
- [Domain et Monnet 2005] C. Domain, G. Monnet, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 215506 (2005).
- [Duesbery *et al.* 1973] M. S. Duesbery, V. Vitek, D. K. Bowen, *Proc. R. Soc. Lond.* **A332**, 85 (1973).
- [Escaig 1968] B. Escaig, *Phys. Stat. Sol.* **28**, 463 (1968).
- [Franciosi 1983] P. Franciosi, *Acta Metall.* **31**, 1331 (1983).
- [Franciosi 1984] P. Franciosi, Thèse de doctorat de l’Université Paris-Nord (1984).
- [Frederiksen et Jacobsen 2003] S. L. Frederiksen, K. W. Jacobsen, *Phil. Mag.* **83**, 365 (2003).
- [Gourgues *et al.* 2001] A.-F. Gourgues, H. M. Flower, T. C. Lindley, *Mater. Sci. & Tech.* **16**, 26 (2001).
- [Hausild 2002] P. Hausild, Thèse de doctorat de l’Ecole Centrale Paris (2002).
- [Hoekstra *et al.* 1977] S. Hoekstra, H. M. M. Van Der Lelie, C. A. Verbraak, *Acta Metall.* **26**, 1517 (1978).
- [Jaoul et Gonzalez 1960] B. Jaoul, D. Gonzalez, *J. Mech. Phys. Solids* **9**, 16 (1960).
- [Karlik 2002] M. Karlik, rapport de Czech Technical University in Prague V-KMAT-516/02 (2002).
- [Karlik *et al.* 2003] M. Karlik, I. Nebdal, J. Siegl, *Mat. Sci. Eng.* **A357**, 423 (2003).
- [Keh 1964] A. S. Keh, *Phil. Mag. Ser.* **8, 12**, 9 (1964).
- [Keh et Nakada 1967] A. S. Keh, Y. Nakada, *Can. J. Phys.* **45**, 1101 (1967).
- [Keh et Nakada 1968] A. S. Keh, Y. Nakada, *Trans. JIM* **9**, 876 (1968).
- [Kocks et Mecking 2003] U. F. Kocks, H. Mecking, *Prog. Mat. Sci.* **48**, 171 (2003).



- [Kubin 1980] L. Kubin, *Hardening of Metals*, Freund Publishing House, 67 (1980).
- [Kumagai *et al.* 1990a] J. Kumagai, S. Takaki, S. Suzuki, H. Kimura, *Mat. Trans. JIM* **2**, 118 (1990).
- [Kumagai *et al.* 1990b] J. Kumagai, S. Takaki, S. Suzuki, H. Kimura, *Mat. Sci. Eng. A* **129**, 207 (1990).
- [Kuramoto *et al.* 1979] E. Kuramoto, Y. Aono, K. Kitajima, *Scripta Metall.* **13**, 1039 (1979).
- [Le Bec *et al.* 1995] P. Le Bec, D. Renaud, J.C. Van Duysen, note EDF HT-41/95/050/A (1995).
- [Low et Turkalo 1961] J. R. Low, Jr., A. M. Turkalo, *Acta Metall.* **10**, 215 (1961).
- [Martin 1990] I. Martin, Rapport de stage de l'Ecole Centrale Paris (1990).
- [Mathieu 2006] J.P. Mathieu, Thèse de doctorat de l'Ecole Nationale Supérieure d'Arts et Metiers (2006).
- [Miloudi 1997] S. Miloudi, Thèse de doctorat de l'université d'Orsay (1997).
- [Mitchell 1964] T. E. Mitchell, *P. Appl. Mater. Res.* **6**, 77 (1964).
- [Naamane *et al.* 2007] S. Naamane, G. Monnet, B. Devincere, publication à venir (2007).
- [Nine 1970] H. D. Nine, *Scripta Met.* **4**, 887 (1970).
- [Novaha *et al.* 2003] J. Nohava, P. Haušild, M. Karlik, P. Bompard, *Materials Charact.* **49**, 211 (2003).
- [Ohmori 2002] Y. Ohmori, *Scripta Mat.* **47**, 201 (2002).
- [Ohmori et Maki 1991] Y. Ohmori, T. Maki, *Mat. Trans. JIM* **8**, 631 (1991).
- [Opinsky et Smoluchowski 1951] A. J. Opinsky, R. Smoluchowski, *J. Applied Phys.* **22**, 1380 (1951).
- [Pareige 1994] P. Pareige, Thèse de doctorat de l'Université de Rouen (1994).
- [Pesci 2004] R. Pesci, Thèse de doctorat de l'Ecole Nationale Supérieure d'Arts et Metiers (2004).
- [Pesci *et al.* 2003] R. Pesci, K. Inal, M. Berveiller, R. Masson, *Mécanique & Industries* **4**, 457 (2003).
- [Quesnel *et al.* 1974] D.J. Quesnel, A. Sato, M. Meshii, *Mat. Sci. Eng.* **18**, 199 (1974).
- [Robertson *et al.* 2007] C. F. Robertson, K. Ortlík, B. Marini, *J. Nucl. Mater.*, article sous presse (2007).
- [Rollet et Kocks 1994] A.D. Rollet, U.F. Kocks. In: *Sol. Stat. Phenomena, Dislocations 93*, Ed. J. Rabier, A. George, Y. Brechet, K. Kubin. Scites Publications, Switzerland 35–36, 1 (1994).
- [Šesták et Seeger 1971] B. Šesták, A. Seeger, *Phys. Stat. Sol. b* **43**, 433 (1971).
- [Sestier 1998] K. Sestier, Thèse de l'Institut National Polytechnique de Grenoble (1998).

- [Sevillano 1993] J. G. Sevillano, *Mat. Sci. Tech.* **6**, 21 (1993).
- [Spitzig 1972] W. A. Spitzig, *Mat. Sci. Eng.* **12**, 191 (1973).
- [Spitzig et Keh 1970a] W. A. Spitzig, A. S. Keh, *Acta Metall.* **18**, 611 (1970).
- [Spitzig et Keh 1970b] W. A. Spitzig, A. S. Keh, *Metall. Trans.* **1**, 2751 (1970).
- [Srinivasan et Wayman 1967] G. R. Srinivasan, C. M. Wayman, *Acta Metall.* **16**, 621 (1968).
- [Steijn et Brick 1953] R. P. Steijn, R. M. Brick, *Trans. ASM* **46**, 1406 (1953).
- [Takeuchi 1975] T. Takeuchi, *Trans. JIM* **16**, 629 (1975).
- [Takeuchi *et al.* 1967] S. Takeuchi, E. Furubayashi, T. Taoka, *Acta Metall.* **15**, 1179 (1967).
- [Taoka *et al.* 1964] T. Taoka, S. Takeuchi, E. Furubayashi, *J. Phys. Soc Japan* **19**, (1964).
- [Van Der Walt 1969] C. M. Van Der Walt, *Acta Metall.* **17**, 393 (1969).
- [Vitek 1974] V. Vitek, *Cryst. Latt. Defects* **5**, 1 (1974).
- [Vitek *et al.* 2004] V. Vitek, M. Mrovec, J. L. Bassani, *Mat. Sci. Eng.* **A365**, 31 (2004).
- [Vogel et Brick 1953] F. L. Vogel, Jr., R. M. Brick, *J. Metall AIME*, 700 (1953).

---

## CHAPITRE II. METHODOLOGIE

---

<b>Introduction</b>	<b>37</b>
<b>II.1.Quelles simulations pour les aciers de cuve</b>	<b>38</b>
II.1.1.Choix des systèmes de glissement actifs	38
II.1.2.Prise en compte de la présence des éléments d'alliage	39
II.1.3.Prise en compte de la morphologie bainitique des aciers de cuve	41
<b>Résumé</b>	<b>42</b>
<b>II.2.Introduction au code de dynamique de dislocations microMégas</b>	<b>43</b>
II.2.1.Discretisation de l'espace dans la structure cubique centrée	45
II.2.2.Calcul des forces sur les segments	46
II.2.3.Loi de mobilité	48
II.2.4.Règles locales	49
II.2.5.Détection des obstacles	50
II.2.6.Problèmes induits par les Conditions aux Limites	51
<b>II.3.Tests élémentaires de validation</b>	<b>55</b>
II.3.1.Influence de la longueur de la source	55
II.3.2.Influence de la longueur de discrétisation	57
II.3.3.Influence du pas de temps	59
<b>Résumé</b>	<b>61</b>
<b>Bibliographie</b>	<b>62</b>

---

### Introduction

Ce second chapitre assure le lien entre les observations expérimentales et les futures simulations, nécessaires à la compréhension du comportement plastique de la ferrite. La Dynamique de Dislocations (DD) est une technique spécifique et relativement récente. Il est donc primordial de bien maîtriser son fonctionnement, afin d'en faire une utilisation judicieuse,

tout en respectant son domaine de validité.

Nous allons, pour débiter, présenter comment est traitée la plasticité de la structure CC et comment rendre compte des spécificités de la ferrite des aciers de cuve. Cette discussion est volontairement séparée de l'introduction du code de DD, afin de dissocier aspect technique et hypothèses concernant la physique. Ensuite, la seconde partie du chapitre s'intéressera aux étapes clefs du code de DD utilisé, en insistant sur les traitements particuliers liés au fer. Enfin, ce chapitre s'achèvera sur la présentation des premières simulations réalisées dans le but de valider les modifications techniques que nous avons introduites pour répondre aux besoins de cette étude. Ces simulations seront l'occasion de définir les domaines de validité de certains paramètres des simulations.

## II.1. Quelles simulations pour les aciers de cuve

Le premier chapitre a mis en évidence certains points d'ombre concernant le comportement du fer et la microstructure de l'acier de cuve. Il ressort trois aspects fondamentaux, sur lesquels nous devons prendre position :

- La nature des systèmes de glissement à considérer dans le fer,
- comment rendre compte de la présence des éléments d'alliage,
- et enfin quel est le rôle de la morphologie bainitique sur le comportement plastique des aciers.

Ces points sont discutés dans ce qui suit.

### II.1.1. Choix des systèmes de glissement actifs

La revue bibliographique du premier chapitre a montré que le comportement plastique des aciers de cuve est lié à celui de la ferrite. En outre, le glissement dans le fer s'opère selon des plans cristallographiques. Les plans de la famille  $\{110\}$  sont systématiquement observés, viennent ensuite les plans  $\{112\}$ . D'une part, ces derniers sont asymétriques, avec l'existence d'un sens facile (sens de maclage) et un sens difficile (ou antimaclage). Autant l'activité des systèmes de plans  $\{112\}$  dans le sens de maclage, semble bien établie dans le fer pur, grâce notamment à l'observation des lignes de glissement [Takeuchi *et al.* 1967] ou d'identification au MET [Keh, 1964], autant l'existence des plans  $\{112\}$  dans le sens d'antimaclage est discutable. Les lignes de glissements sont en effet toujours sinueuses ce qui rend incertaine l'identification des plans mis en jeu [Franciosi 1983, Takeuchi *et al.* 1967]. Or, un glissement macroscopique suivant un plan  $\{112\}$  peut tout à fait se décomposer en deux glissements selon des plans  $\{110\}$ . D'autre part, les systèmes de plans  $\{110\}$  sont les seuls systèmes activables si la cission critique sur les plans  $\{112\}$  est supérieure de 15 % à celle des systèmes  $\{110\}$ , en

supposant que la loi de Schmid est respectée. Or la différence entre la cission des systèmes  $\{112\}$  dans le sens d'antimaclage est relativement proche de cette valeur [Franciosi 1983, Spitzig et Keh 1970].

La discussion se complique si l'on tient compte de la présence des impuretés. Il n'est pas certain que ce qui est vrai dans le cas du fer pur, le soit au sujet de la ferrite. Franciosi [Franciosi 1983] suggère que les systèmes  $\{112\}$  sont plus sensibles à la présence d'éléments interstitiels, et notamment le carbone, à cause de la position octaédrique qu'ils occupent. Les mesures par Sonde Atomique (SA) indiquent que la ferrite des aciers de cuve contient environ 100 ppm de carbone [Pareige 1994]. Cette teneur est très supérieure à la moyenne de 20 ppm des monocristaux de fer de la littérature pour lesquels du glissement suivant les plans  $\{112\}$  a été observé. Cependant la suggestion de Franciosi n'a jusqu'à présent pas été démontrée. Sans plus d'informations expérimentales, la discussion ne peut être poussée plus loin. Comme ce travail est l'un des premiers sur le fer, nous avons décidé de n'introduire que les systèmes  $\{110\}$  dans les simulations de DD. L'ambiguïté associée à l'activation ou non des systèmes de plans  $\{112\}$  sera contournée par le choix de sollicitations au centre du triangle standard.

### II.1.2. Prise en compte de la présence des éléments d'alliage

La présence d'éléments d'alliage en solution solide dans la matrice ferritique des aciers de cuve est un point non négligeable. Les éléments d'alliage produisent à la fois une distorsion de la matrice et constituent des obstacles aux dislocations. Ils affectent donc la mobilité des dislocations, et en particulier les éléments interstitiels. Mais en dépit de nombreux efforts de modélisation (*cf.* [Friedel 1964]) et les avancées permises par les simulations de Dynamique Moléculaire (DM) récentes notamment dans le cas du carbone en solution solide dans le fer [Tapasa *et al.* 2006], il est difficile de définir précisément la contrainte associée à une concentration donnée de carbone. Monnet et Devincré [Monnet et Devincré 2005] proposent de prendre en compte les effets des éléments en solution solide d'une manière phénoménologique, par le biais d'une contrainte de friction d'alliage  $\tau_F$ . C'est l'approche que nous allons reprendre.

Il est possible de remonter à la contrainte de friction d'alliage  $\tau_F$ , moyennant quelques hypothèses concernant le durcissement de la forêt. Dans le domaine athermique, la contrainte d'écoulement de la ferrite est la résultante de deux mécanismes : d'une part la friction avec les éléments en solution solide et d'autre part les différentes interactions entre dislocations. La contrainte d'écoulement  $\tau_c$  se décompose de la manière suivante :

$$\tau_c = \tau_F + \alpha\mu b\sqrt{\rho} \quad \text{Équation II.1}$$

Le terme associé aux interactions entre dislocations fait intervenir le module de cisaillement

$\mu$ , la norme du vecteur de Burgers  $b$ , et la densité de dislocations de forêt  $\rho$ . Le coefficient  $\alpha$  est le coefficient d'interaction, il mesure la force moyenne d'interaction entre les dislocations. La cission critique est déterminée à partir d'essais de traction de la littérature sur des monocristaux.

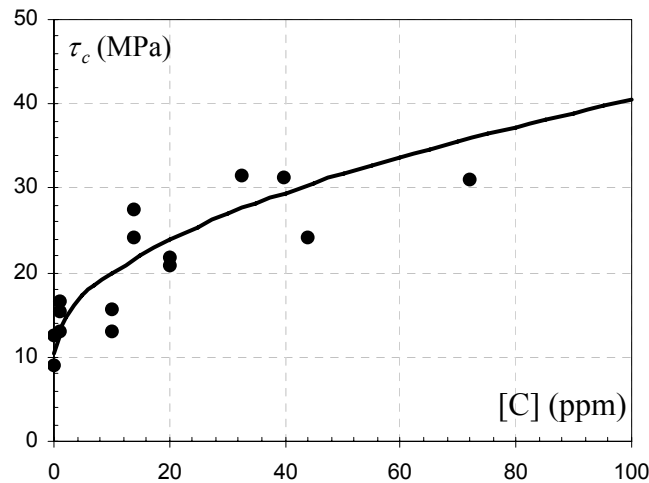


Figure II.1. Compilation des cissions critiques obtenues dans des monocristaux de fer, en fonction de la teneur en carbone massique [Franciosi 1983; Stein *et al.* 1963, Solomon et McMahon 1971, Spitzig et Keh 1970, Stein 1966, Taoka *et al.* 1964, Kuramoto *et al.* 1979, Quesnel *et al.* 1974].

La figure II.1 compile les valeurs de la contrainte d'écoulement en fonction de la teneur en carbone [Franciosi 1983; Stein *et al.* 1963, Solomon et McMahon 1971, Spitzig et Keh 1970, Stein 1966, Taoka *et al.* 1964, Kuramoto *et al.* 1979, Quesnel *et al.* 1974]. Malgré la dispersion des valeurs, la contrainte athermique augmente assez nettement avec la concentration en carbone. Cette tendance peut être approchée par une racine carrée, et elle est représentée dans la figure. Pour les basses teneurs en carbones, la contrainte d'écoulement ne baisse pas en dessous d'une valeur de 10 MPa. Ce seuil athermique est assez grand, en comparaison avec la contrainte d'écoulement des matériaux CFC [Mitchell 1964]. Seules les interactions entre dislocations peuvent expliquer une telle valeur, qui correspond donc au terme  $\alpha\mu b\sqrt{\rho}$  de l'équation II.1. On prendra pour le fer un module de cisaillement  $\mu$  de 62,5 GPa, et un vecteur de Burgers  $b = \frac{1}{2}\langle 111 \rangle = 2,48 \cdot 10^{-10}$  m [Osetsky et Bacon 2003]. Le coefficient d'interaction  $\alpha$  est généralement pris de l'ordre de 0,3 [Keh 1964, Lavrentev 1980]. Ces valeurs permettent alors d'estimer la densité initiale de dislocations de l'ordre de  $10^{12}$  m<sup>-2</sup>. Cette densité est très supérieure à celle présente initialement dans les matériaux CFC, et est induite par la technique d'élaboration des monocristaux de fer. Il est en effet seulement possible d'obtenir des monocristaux de fer par écrouissage critique suivi d'un recuit de recristallisation, et non pas selon la solidification directionnelle de Bridgman. Pour une teneur en carbone de 100 ppm, qui

est celle mesurée au sein de la ferrite des aciers de cuve, la contrainte d'écoulement est de l'ordre de 40 MPa. L'équation II.1 permet ainsi d'estimer la contrainte de friction d'alliage à 30 MPa. Cette valeur assez grande, souligne la forte interaction induite par le carbone, qui de par sa position interstitielle donne lieu à une distorsion importante de la matrice de fer. La friction  $\tau_F = 30$  MPa sera celle utilisée tout au long de ce travail.

Cette estimation est à présent discutée. D'une part, la manière de combiner deux mécanismes de durcissement est un ancien problème dont il n'existe pas de solution unique. Brown et Ham [Brown et Ham 1971] ainsi que Nembach [Nembach 1996] proposent une revue des différentes lois de mélange envisageables, et elles seront discutées en détail au cours du chapitre IV. L'équation II.1 est basée sur l'hypothèse la plus simple d'une composition linéaire entre friction d'alliage et les interactions de la forêt. Cette loi linéaire a également été choisie dans d'autres travaux récents portant sur le rôle des éléments d'alliage [Rickman *et al.* 2002, Picu 2004]. Ensuite, la valeur de 30 MPa ne tient compte que de la teneur en carbone. Il s'agit certainement de la plus forte contribution, les autres éléments d'alliage, qui sont substitutionnels, modifient moins le comportement plastique du fer [Takeuchi 1968, Okazaki 1996]. D'un autre côté, il faut souligner que la valeur de la friction d'alliage est estimée à partir d'expériences à température ambiante, assez éloignée de la température de fonctionnement des cuves de 300 °C. Or l'activation thermique abaisse les effets durcissants des éléments d'alliage [Tapasa *et al.* 2006]. Au final, ces deux derniers points ont des effets antagonistes. La valeur de 30 MPa peut être considérée comme la meilleure estimation dont nous pouvons disposer à l'heure actuelle.

### II.1.3. Prise en compte de la morphologie bainitique des aciers de cuve

Le chapitre précédent a montré que la microstructure majoritaire de l'acier de cuve est constituée d'une part de lattes bainitiques « pauvres » en carbures, et d'îlots plus petits contenant les amas de carbures. Il est raisonnable de penser que le comportement plastique de cet acier est relié au comportement plastique des lattes pauvres en carbures, qui est majoritaire en volume. Ensuite, la densité en carbures des amas est telle, qu'ils ne sont séparés en moyenne que de quelques dixièmes de microns, comme le montre la Figure I.7. Partant de la relation d'Orowan  $\tau = \mu b/l$ , il est possible d'estimer la contrainte nécessaire à mobiliser les dislocations dans ces amas. Le module de cisaillement  $\mu$  vaut 83,6 GPa dans un acier à l'ambiante [Ghosh et Olson 2002]. A titre d'illustration l'espacement  $l$  entre carbures dans les amas est pris comme 0,2  $\mu\text{m}$  (*cf.* figure I.7). La contrainte induite par les amas de carbures est considérable, de l'ordre de 100 MPa. A cela s'ajoutent les interactions avec la forêt, et la friction avec les éléments d'alliage. C'est pourquoi les études à l'échelle mésoscopique, telles que les simulations de DD, doivent donc logiquement porter sur les lattes « pauvres » en carbures. L'effet composite induit par la présence d'une phase dure (les amas) au sein d'une phase molle (les lattes), sera laissée à

d'autres approches plus adaptées, permettant de travailler à une échelle spatiale supérieure. En ce sens, Mathieu [Mathieu 2006] montre que l'effet composite est relativement fort, par la mise en œuvre des simulations d'agrégats par Eléments Finis qui rend compte de la présence des amas par le biais d'un modèle de transition d'échelle.

Cette discussion est également l'occasion d'introduire les différentes sources de durcissement présentes dans les aciers de cuve, qu'il est nécessaire de prendre en compte. L'écroutissage de la forêt lié aux interactions entre dislocations sera étudié dans le Chapitre III. Les conclusions relatives à ce chapitre peuvent être transposées sans trop de difficultés à d'autres matériaux CC, limitation faite au régime athermique. Le Chapitre IV présentera le durcissement microstructural associé à la morphologie bainitique. L'essentiel de ce chapitre sera consacré aux interactions avec les carbures qui, malgré une densité bien faible en comparaison à celle au sein des amas, induisent un durcissement non négligeable. Enfin la dernière contribution à la contrainte d'écoulement est associée aux interactions avec les défauts d'irradiation. Ils seront l'objet du dernier chapitre de ce travail.

### Résumé

---

Seuls les systèmes  $\frac{1}{2} \langle 111 \rangle \{110\}$  seront considérés dans nos simulations. Les directions de sollicitation seront choisies de manière à activer seulement ces systèmes.

La présence des éléments d'alliage qui réduisent la mobilité des dislocations est prise en compte d'une manière phénoménologique au travers d'une contrainte de friction d'alliage qui s'ajoute à la contribution de la forêt. Le durcissement est essentiellement dû aux interactions avec les éléments interstitiels dont le carbone. La contrainte de friction d'alliage est estimée à 30 MPa en se basant sur des résultats expérimentaux.

La plasticité des aciers de cuve est fournie par les lattes de ferrite majoritaires en volume, qui sont pauvres en carbures. Les simulations de DD porteront sur cette microstructure et devront rendre compte des trois mécanismes de durcissement qui lui sont associées, à savoir d'une part les interactions entre dislocations, ensuite le durcissement induit par les carbures intra-lattes et enfin les interactions avec les défauts d'irradiations.

---



## II.2. Introduction au code de dynamique de dislocations microMégas

Les simulations de DD constituent l'étape intermédiaire indispensable entre les approches atomiques qui se focalisent sur les propriétés élémentaires des dislocations, et les approches macroscopiques qui font abstraction du glissement des dislocations aux profits de champs de déformations et de contraintes continus. A l'échelle de la DD, l'échelle mésoscopique, le comportement plastique est contrôlé par l'arrangement complexe des dislocations dans l'espace et aux interactions à courte et longue portées qu'elles s'exercent mutuellement. Les simulations de DD font essentiellement appel à la théorie élastique des dislocations. Les propriétés de cœurs des dislocations sont quant à elles traitées au travers de règles locales, qui font toute la richesse et la diversité des codes de DD actuels. Les lois régissant la mobilité, ou le glissement dévié sont deux exemples illustratifs des règles locales.

A cause des limitations en terme de puissance de calcul, les premières simulations de DD ont porté sur des configurations simplifiées de dislocations, généralement limitées à une représentation 2D. Parmi ces travaux pionniers, il faut souligner ceux réalisés par Foreman et Makin [Foreman et Makin 1966, Foreman 1967] et Bacon [Bacon *et al.* 1973], qui doivent beaucoup aux modèles analytiques de Brown [Brown 1964]. Ils ont permis, en outre, de définir certains écueils associés au calcul des forces ou aux procédures de discrétisations. On trouvera tout au long de ce travail des références à ces travaux fondamentaux. Les approches en 2D sont loin d'être délaissées encore aujourd'hui, de par leur simplicité de mise en œuvre et leur temps de calculs réduits. Elles se sont montrées très pertinentes, par exemple, pour l'étude des effets d'échelle induits lors de la déformation des matériaux nanostructurés [Van der Giessen *et al.* 1995, Nicola *et al.* 2003, Lefebvre *et al.* 2006]. Néanmoins, pour de nombreuses études, les simplifications associées aux simulations à 2D sont critiquables, et les approches à 3D sont préférées, permettant de rendre compte de la totalité des interactions qui sont mises en jeu au sein de la microstructure des dislocations.

Les codes de DD sont aujourd'hui nombreux (*cf.* [Schwarz 1999] pour une revue des différentes approches) et les applications se sont diversifiées, signe que la technique est désormais mature et a fait ses preuves. En partant des premières études consacrées aux interactions entre dislocations [Madec *et al.* 2002, Bulatov *et al.* 2006, Devincré *et al.* 2006], les simulations de DD ont été confrontées à d'autres problèmes métallurgiques comme le durcissement par précipitation [Mohles 2001, Monnet 2006] en passant par l'étude des effets d'échelles ou de confinement [Schwarz et Tersoff 1996, Lefebvre *et al.* 2006] ou encore, des chargements spécifiques comme la fatigue [Shin *et al.* 2005] ou la nanoindentation [Fivel *et al.* 1998]. Les matériaux étudiés se sont également diversifiés en partant de la structure CFC [Madec *et al.* 2002, Devincré *et al.* 2006] les matériaux de structure Hexagonales Compactes

(HC) [Monnet *et al.* 2004] et CC [Madec et Kubin 2004b, Rhee *et al.* 1998] font désormais l'objet de travaux récents. Enfin, des méthodes hybrides couplant simulations de DD et approches continues ont récemment vu le jour [Verdier *et al.* 1998, Lemarchand *et al.* 2001]. Une comparaison entre force et faiblesse des approches existantes peut être trouvée dans [Devincre *et al.* 2003]

Très schématiquement, un code de DD se décompose en trois étapes clefs. (i) Le calcul des forces qui s'exercent sur les objets utilisés pour la description des dislocations. Ceci est réalisé à l'aide de la théorie élastique des dislocations. La principale difficulté survenant du fait que l'état de contrainte en un point du volume simulé est la composition des champs de contraintes induits par la totalité des dislocations présentes dans le volume simulé. (ii) Connaissant la contrainte s'exerçant sur chaque segment, leur déplacement peut être prédit à l'aide d'une loi de mobilité. Autrement dit, la force sur chaque segment est la cause de son déplacement. (iii) Les mécanismes qui sont reliés à des propriétés de cœur des dislocations, comme le glissement dévié des vis, sont pris en compte au travers de règles locales.

Cette partie va s'attacher à présenter les principales caractéristiques du code de DD utilisé dans le cadre de ce travail. Il s'agit du code microMégas (également appelé mM) développé à partir du début des années 1990. mM est un logiciel libre distribué sous licence GPL (GNU Public Licence). Son développement est essentiellement réalisé entre le Laboratoire d'Etude des Microstructures (LEM, UMR du CNRS et de l'ONERA) et EDF R&D. Il a bénéficié du travail de développement d'une dizaine de personnes. Partant de la structure CFC pour laquelle mM était destiné à ses débuts, le code permet dorénavant l'étude de la plasticité de matériaux de structure Hexagonale Compacte (HC) [Monnet 2005], CC [Monnet et Queyreau 2005] et cubique simple. Une des spécificités majeures de microMégas réside dans la discrétisation de l'espace utilisée pour résoudre les positions des dislocations. Le réseau de simulations est homothétique au réseau réel. En distinction avec les autres codes de DD existants, les dislocations sont représentées par une succession de segments interconnectés d'orientation fixes. Des informations complémentaires sur le fonctionnement du code microMégas sont disponibles dans [Devincre 1994, Madec 2001], ou plus récemment [Devincre 2005].

Les dislocations sont assimilées à une succession de vecteurs interconnectés, appelés vecteurs lignes. La philosophie de mM à ce sujet est de limiter le nombre de vecteurs disponibles pour discrétiser les lignes de dislocations, afin de réduire le nombre de degrés de liberté des lignes de dislocations et pouvoir utiliser de grands pas de temps. La flexibilité perdue (en terme de description des courbures) est compensée par les longueurs des segments qui s'adaptent à la courbure locale. Considérons pour illustrer ce qui suit, le système primaire  $\frac{1}{2} [1\bar{1}1]$  (110). Suivant les conventions adoptées dans mM, la construction d'une base de vecteurs minimale à la description des configurations doit répondre à deux contraintes. D'une

part les directions physiques remarquables vis  $[1\bar{1}1]$  et coin  $[\bar{1}12]$  sont représentées et d'autre part les directions d'intersection avec les autres plans sont explicitement introduites. Dans le cas des plans  $\{110\}$ , elles sont au nombre de trois et correspondent aux directions mixtes  $[001]$ ,  $[1\bar{1}\bar{1}]$  et à la direction  $[1\bar{1}1]$  qui est aussi le vecteur de Burgers du système primaire. Huit vecteurs lignes suffisent donc pour discrétiser chacun des douze systèmes de plans  $\{110\}$  et leurs intersections. Comme le montre la figure II.2 qui donne en exemple les vecteurs de discrétisation pour le système  $\frac{1}{2} [1\bar{1}1] (110)$ , la base de discrétisation n'est pas symétrique. Ceci contraste avec les bases utilisées jusqu'à présent dans mM. Il était donc crucial de vérifier que l'utilisation d'une telle base n'affecte pas la description de la courbure des dislocations et donc de la dynamique.

### II.2.1. Discrétisation de l'espace dans la structure cubique centrée

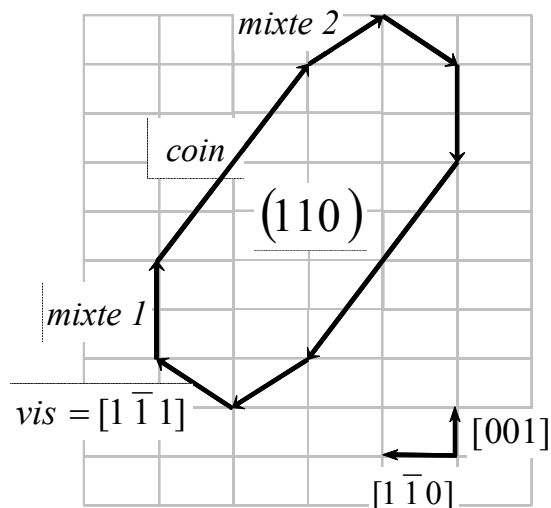


Figure II.2. Base de vecteurs lignes pour la discrétisation du système  $\frac{1}{2} [1\bar{1}1] (110)$ .

On pourra se référer à [Madec 2001] pour une présentation des différentes règles de connexion entre les vecteurs lignes, la manière de déplacer les segments et autres règles topologiques. On retiendra simplement que les segments se déplacent par translation, entraînant l'allongement ou la réduction de sa norme et de celles des voisins. Les points de connexion sont déplacés en suivant l'orientation des voisins. Autrement dit, un segment se déplace sur des rails qui correspondent à ses segments voisins.

Deux déplacements sont donnés en exemples dans la figure II.3. A chaque vecteur ligne  $\vec{\ell}$  lui est associé un vecteur orthogonal, le vecteur de déplacement  $\vec{d}$ , qui définit la direction du mouvement du vecteur ligne. La norme du vecteur déplacement définit également l'amplitude

minimale pour que le vecteur ligne soit à nouveau sur une position équivalente du réseau de simulation. Cependant la translation minimale que peut parcourir un segment diffère suivant le voisinage (cf. figure II.3). Dans le premier exemple, le déplacement est un multiple de  $\vec{d}$ , alors qu'il doit être de  $2\vec{d}$  dans le second cas pour que la longueur du segment à déplacer reste entière. L'ensemble des vecteurs de lignes, déplacements et des normales aux plans de glissement définit une Base de Vecteur de Discrétisation (BVD), qui constitue la base de la description des dislocations et de l'espace de simulation. Cette base notée BVD.CC est donnée en annexe.

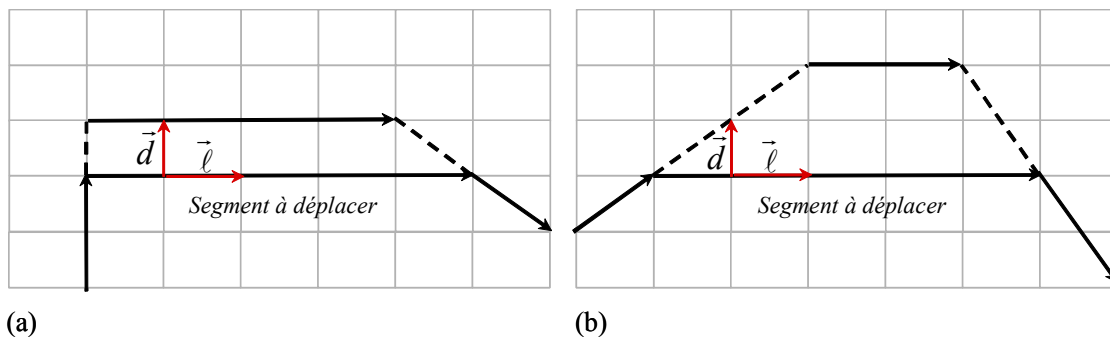


Figure II.3. Schématisation du déplacement d'un segment qui reste compatible avec les voisins. Le quadrillage gris représente les positions et longueurs que peut prendre le segment à déplacer, positions qu'il ne faut pas confondre avec une représentation de la structure CC.

## II.2.2. Calcul des forces sur les segments

Le calcul des forces sur chacun des segments de dislocations constitue une des étapes clés des simulations de DD et également l'opération la plus coûteuse en temps de calcul. C'est pourquoi de nombreux efforts ont été réalisés récemment pour simplifier ces calculs. En particulier, la méthode des multipôles et la sous-intégration temporelle sont présentées en détails dans [Madec 2001, Devinre 2005].

La force qui s'exerce sur un segment provient de plusieurs contributions distinctes. D'une part, le champ de contraintes appliqué qui est supposé uniforme dans le volume de simulation et dont les variations sont reliées au mode de chargement souhaité. Et d'autre part la somme des champs de contraintes associés à chacun des segments présents dans l'élément de matière simulé. Ce calcul est réalisé à l'aide de la théorie élastique des dislocations, dans l'hypothèse de l'élasticité isotrope linéaire. En ce sens Devinre a proposé [Devinre 1995] une formulation du champ de contrainte induit par un segment de dislocation, prenant comme point de départ les formulations dites compactes de De Wit [De Wit 1967]. En pratique, les calculs des différentes contributions sont réalisés au centre du segment considéré. L'hypothèse d'isotropie peut être

discutée suivant les matériaux traités, mais l'intérêt d'une formulation anisotrope reste limité. Rhee et ses collaborateurs [Rhee *et al.* 2000] ont comparé les champs de contrainte induits par un segment de dislocations utilisant des formulations basées sur les deux hypothèses d'élasticité isotrope et anisotrope, et montrent ainsi que les différences entre les deux calculs convergent à longue distance dans le cas du molybdène (dont le coefficient d'anisotropie est de 0,77).

Le champ de contraintes internes fait intervenir la distance entre les deux segments mis en jeu (le segment origine du champ de contraintes qui s'applique sur le segment considéré, et ce dernier). Or les diverses expressions proposées divergent à courte distance, de l'ordre de quelques Burgers, et ne peuvent donc pas être utilisées. De plus, la courbure locale est supprimée sur les éléments de discrétisation, puisqu'il s'agit de segments rectilignes. L'énergie de ligne est ainsi sous-estimée. C'est pour ces deux points que le calcul du champ de contraintes induit par les voisins du segment considéré est remplacé par un calcul de tension de ligne. Plusieurs expressions de tension de ligne sont disponibles dans la littérature suivant la démarche ou la procédure de discrétisation choisie [De Wit et Koehler 1959, Foreman 1967, Mohles 2001]. Pour des raisons historiques, deux formulations somme toute assez semblables ont été utilisées au cours de ce travail. Les simulations qui seront présentées au chapitre III pour l'étude du mécanisme de la forêt, ont été mises en œuvre à l'aide de la formule de tension de ligne proposée par De Wit et Koehler [De Wit et Koehler 1959] qui prend la forme donnée en équation II.2 :

$$T_l = \frac{\mu b^2}{4\pi} \left( \frac{1+\nu - 3\nu \sin^2 \theta}{1-\nu} \right) \ln \left( \frac{R}{r_0} \right) \quad \text{Équation II.2}$$

dans laquelle,  $\nu$  est le coefficient de poisson,  $\theta$  l'angle formé par la direction de la ligne de dislocation et le vecteur de Burgers. Le rayon de coupure  $R$  est pris comme le rayon de courbure local. Le rayon  $r_0$  est pris comme la norme du vecteur de Burgers. L'expression proposée par Mohles [Mohles 2001] a été ensuite préférée pour les simulations portant sur les carbures et les défauts d'irradiation.

$$T_l = \frac{\mu b^2}{4\pi} \left( \frac{1+\nu - 3\nu \sin^2 \theta}{1-\nu} \right) \ln \left( \frac{2\Lambda}{r_0} \right) \quad \text{Équation II.3}$$

Elle ne diffère de celle de De Wit et Koehler, que par le rayon de coupure supérieur, qui correspond désormais à la longueur de l'arc de cercle  $2\Lambda = \theta R$  sous-tendu par l'angle  $\theta$ .

Le calcul de la courbure locale  $R$  constitue un vrai problème en soit, de part la multitude de cas morphologiques qui existent. La courbure est généralement définie par un arc de cercle passant par trois points, par exemple, les milieux du segment considéré et de ses voisins. Cependant dans le cas d'une forte courbure locale, son calcul à partir des premiers segments voisins peut s'avérer mauvais (*cf.* [Schwartz 1999]). Or ce problème s'est rapidement pausé lors

de l'étude des interactions avec des défauts d'irradiation de taille nanométrique. Pour éviter cela, nous avons introduit une distance minimale entre les trois points intervenant dans le calcul de la courbure (*cf.* figure II.4). Cette distance est adaptée à la longueur de discrétisation qui elle-même est choisie suivant les grandeurs caractéristiques du problème étudié.

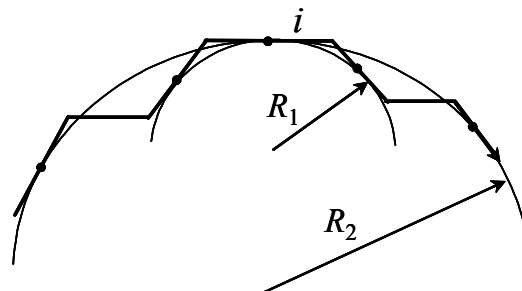


Figure II.4. Comparaison entre les rayons de courbure d'un segment  $i$ , définis à partir de premiers voisins ( $R_1$ ) ou de voisins à une plus grande distance ( $R_2$ ). La configuration correspond ici à une très forte courbure, pour mettre à l'évidence la différence significative que donnent les deux calculs.

La contrainte interne induite par l'ensemble des segments de dislocations est ensuite projetée dans le plan et suivant la direction de glissement à l'aide de la relation de Peach et Koehler [Peach et Koehler 1950]. Au final, la somme de ces trois contributions, c'est-à-dire contrainte appliquée, contrainte interne et la tension de ligne, définit la contrainte effective  $\tau_{eff}$  sur le segment considéré.

Une réduction du temps de simulation associé au calcul des forces est permise par la méthode dite des boîtes [Madec 2001]. Elle est plus connue sous le nom d'algorithme des multipôles à l'ordre un. Un unique pôle est associé à chaque domaine. L'idée sous-jacente est que les contributions des segments lointains évoluent peu en comparaison de la contribution induite par des segments proches. Le volume de simulation est alors régionalisé, découpé en boîtes, et la contribution des segments appartenant aux boîtes les plus éloignées n'est plus calculée à chaque itération. On trouvera à ce sujet plus de détail dans [Madec 2001].

### II.2.3. Loi de mobilité

En pratique, la contrainte de friction d'alliage agit comme un seuil à la mobilité des dislocations. Lorsque la contrainte effective  $\tau_{eff}$  sur un segment ne dépasse pas la contrainte  $\tau_F$ , alors le segment reste immobile. Dans le cas contraire, alors la vitesse  $v$  est reliée linéairement à la contrainte effective. La loi de mobilité est définie par l'équation II.4 :

$$\begin{cases} v=0 & \text{si } |\tau_{eff}| < \tau_F \\ v = \frac{[\tau_{eff} - |\tau_F| \text{signe}(\tau_{eff})] b}{B} & \text{si } |\tau_{eff}| > \tau_F \end{cases} \quad \text{Équation II.4}$$

Le coefficient  $B$  est un coefficient de frottement visqueux qui rend compte principalement de l'interaction des dislocations avec les phonons. Ce type de loi linéaire est très certainement la plus utilisée dans les codes de DD [Devincré 1994, Madec *et al.* 2003, Rhee *et al.* 1998]. Elle fait appel à deux hypothèses qu'il est nécessaire de préciser. D'une part on suppose que la dislocation a atteint le régime stationnaire de vitesse et d'autre part, il n'existe pas de barrière d'énergie forte nécessaire au déplacement des dislocations. Par conséquent l'équation II.4 ne sera plus appropriée pour les très grandes vitesses de déformation ou pour des matériaux sensibles à la température ou la vitesse de déformation. C'est le cas notamment des matériaux de structure CC à basse température. Leur déformation est contrôlée par la mobilité des vis qui met en jeu la formation de doubles décrochements, mécanisme thermiquement activé. Il existe dans la littérature des lois de vitesses spécifiquement adaptées à ces problématiques [Tang *et al.* 1998, Naamane *et al.* 2007].

Urabe et Weertman [Urabe *et al.* 1975] ont déterminé expérimentalement le coefficient de frottement  $B$  dans le fer pur. Pour cela ces auteurs appliquent des sauts de contrainte d'amplitude variable sur un monocristal de fer, et mesurent le déplacement des dislocations préalablement repérées par des figures d'attaque. Leurs expériences portent sur un large domaine de température, allant des basses températures jusqu'à l'ambiante. Ils observent une décroissance du coefficient de frottement avec la température, qui atteint une valeur de l'ordre de  $10^{-4}$  Pa.s à l'ambiante. Il faut sans doute mentionner que les difficultés expérimentales liées à ce type de mesures conduisent à des incertitudes fortes sur les valeurs de  $B$ . On retiendra néanmoins l'ordre de grandeur. Le coefficient  $B$  sera pris comme  $10^{-4}$  Pa.s, dans le cadre de ce travail, ce qui est comparable aux valeurs prises dans d'autres études de DD portant sur la structure CC [Rhee *et al.* 1998].

#### II.2.4. Règles locales

Typiquement, les règles locales sont utilisées pour des mécanismes tels que (i) l'introduction de la direction de réaction entre deux dislocations, (ii) la déviation des segments vis (iii) ou la définition d'un contact au sens large. Ce dernier aspect sera discuté en détail un peu plus loin car il a été réécrit pour les besoins de ce travail.

La revue bibliographique du premier chapitre a mis en évidence les lacunes concernant le glissement dévié dans les matériaux CC, et en particulier le fer. Il est généralement admis comme facile. Et il opère de manière visible dès le début de la déformation plastique comme le montre l'observation des lignes de glissement [Takeuchi *et al.* 1967, Franciosi 1983].

Contrairement aux matériaux CFC [Escaig 1968], les dislocations vis sont compactes dans le fer et ne nécessitent pas la recombinaison des parties avant de changer de plan [Frederiksen et Jacobsen 2003, Domain et Monnet 2005]. Il n'existe donc vraisemblablement pas de barrière d'énergie à surmonter, et suggère ainsi que la déviation n'est conditionnée que par l'état de chargement mécanique. Le critère de déviation introduit dans ce travail reprend cette idée. Une dislocation vis, d'une longueur suffisante, peut changer de plan à la simple condition que la contrainte effective dans un plan de déviation soit supérieure à celle dans le plan de glissement initial. Il s'agit bien évidemment d'une hypothèse de travail, qui correspond à la situation la plus favorable au glissement dévié. Une autre nouveauté technique est liée à la multiplicité des plans envisageables pour la déviation des vis dans les CC. Dans ce travail ils se limitent aux deux systèmes colinéaires de plans  $\{110\}$ , soit un de plus que dans la structure CFC. Si les systèmes de plans  $\{112\}$  sont effectivement activables dans le fer, ils constituent aussi des plans possibles à la déviation. En résumé, il est possible que la déviation soit en réalité un peu plus complexe que la manière dont elle est traitée dans ce travail. Malheureusement, il n'existe pas suffisamment d'information à l'heure actuelle. Cependant, cette remarque ne remet pas en cause les résultats relatifs au glissement dévié qui seront présentés dans le chapitre V. Seul l'aspect quantitatif pourra être discuté.

### **II.2.5. Détection des obstacles**

Le déplacement prédit par le biais de la loi de mobilité ne rend compte qu'indirectement de la présence d'obstacles devant le segment à déplacer. Les interactions attractives de dislocations de la forêt contribuent en effet au déplacement, mais ni le point d'intersection ni le type de réaction ne peuvent être prédits précisément à partir de cette seule information. Il est donc nécessaire de détecter les obstacles, définir la faisabilité de la réaction et ensuite, le cas échéant, introduire sa direction. Il s'agit d'ailleurs d'une étape fondamentale dans la mesure où la déformation plastique à haute température est essentiellement reliée aux interactions à courtes distances entre dislocations [Saada 1964]. Le traitement des jonctions est essentiellement élastique dans mM, sans aucun critère empirique. La jonction est formée si elle est intéressante en terme d'énergie élastique et pourvu qu'une réaction soit acceptable vis à vis du critère de Franck. L'évolution de la jonction, c'est-à-dire son allongement ou son élimination, est contrôlée par l'équilibre mécanique des nœuds triples.

Au début de ce travail de thèse, la partie correspondante, assez ancienne, commençait à manquer de lisibilité. Il était nécessaire de rendre cette partie plus flexible, en vue du traitement de nouveaux obstacles, tels que les particules. Cet exercice a constitué pour moi l'occasion de m'approprier le code, ce qui est une étape indispensable à une parfaite maîtrise des simulations très spécifiques que sont les simulations de DD. Détecter un obstacle est avant tout un problème



géométrique, dont la difficulté n'est pas liée à sa résolution mais essentiellement à la multitude de cas topologiques qui existent. Une attention toute particulière a été portée sur l'algorithme afin d'éviter un surcoût de temps de calcul. Enfin, il ne faut pas oublier que les codes de DD doivent rester évolutifs, afin de traiter de nouveaux problèmes physiques. Beaucoup d'efforts ont été apportés pour rendre les procédures à la fois flexibles et généralisables. Ce contexte étant défini, la présentation détaillée de cette nouvelle procédure est reportée en annexe par soucis de concision. On retiendra simplement les principaux résultats. Ce travail de développement a permis de traiter certains cas topologiques spécifiques autrefois négligés et par liens de cause à effet a supprimé certains bugs. Enfin, des tests ont estimé le gain de temps sur la détection de l'ordre de 50 %, sur des simulations massives. Ce qui représente tout de même une amélioration de près de 10 %, rapportée au temps de calcul total.

Enfin, dans des travaux récents, Bulatov et ses collaborateurs [Bulatov *et al.* 2006] ont montré l'importance de la prise en compte de la formation de multi-jonctions, qui impliquent la recombinaison de plus de deux dislocations. Leurs simulations se concentrent sur le cas des matériaux CC. Ils montrent que la minimisation des énergies de ligne est bien plus intéressante que dans le cas de jonctions binaires (mettant en jeu deux dislocations, ou binômes). A l'heure actuelle, seules les jonctions binaires sont traitées dans microMégas. Le traitement des multi-jonctions nécessite un grand nombre de modifications assez conséquentes qui sont reportées à plus tard. Néanmoins, ces configurations sont déjà repérées, les dislocations étant seulement arrêtées devant des jonctions binaires. Bien qu'il ne s'agisse pas d'un traitement complet, l'apparition de telles configurations conduit au moins à un ancrage des dislocations par la formation de ces pseudo multi-jonctions : des dipôles formés par une jonction binaire et une troisième dislocation. Il faut noter que la prise en compte de ces multi-jonctions n'est pas critique dans le cadre de notre travail. Les simulations de Bulatov montrent que l'occurrence des ces configurations est bien sûr liée aux systèmes de glissement mis en jeu. Les multi-jonctions ont une influence significative dans le comportement en traction suivant un axe [001], mais pas suivant [011]. Or, ces orientations ne sont pas étudiées ici afin d'éviter les domaines d'activation des systèmes de plans {112}.

## II.2.6. Traitement des particules

Pour les besoins de cette étude, nous avons modifié le traitement des particules. Par le passé, elles étaient introduites sous forme de disques dans les plans de glissement. Leur modélisation sous forme de sphères est désormais plus réaliste, en rendant compte de l'aspect volumique de ces obstacles. La détection des contacts avec ces nouveaux obstacles dérive de celle présentée plus haut. La distinction entre les particules cisailables ou non se fait au moyen d'une contrainte de cisaillement  $\tau_s$ , qui est un paramètre de simulation (*cf.* [Monnet 2006]). (i) Un

segment de dislocation peut pénétrer et avancer au sein d'une particule à la condition que la contrainte effective soit supérieure à  $\tau_s$ . (ii) Suivant cette convention, une particule est impénétrable dès lors que la contrainte  $\tau_s$  qui lui est associée est infinie, ou assimilable comme telle.

### II.2.7. Problèmes induits par les Conditions aux Limites

La définition de conditions aux limites adaptées aux simulations de DD est un épineux problème, qui a d'abord été résolu par l'utilisation de conditions de bords libres [Devincre 1994]. Mais pour cela des forces images sont introduites donnant lieu à des effets de bords importants qui réduisent le volume de simulation exploitable. Bulatov et ses collaborateurs [Bulatov *et al.* 2001] ont été les premiers à utiliser et discuter les Conditions aux Limites Périodiques (CLP), encore appelées conditions de Von Karman. Elles reviennent à considérer le volume simulé non plus comme un espace fermé, mais comme un élément de matière noyé dans un cristal périodique infini. En pratique, le volume de simulation est entouré par des volumes images. Chaque segment de dislocation sortant par une face du volume, est balancé par un segment image introduit par la face opposée, assurant ainsi l'équilibre des flux entrant et sortant de dislocations. Ces auteurs ont aussi montré que les CLP permettent de conserver à la fois la continuité des lignes de dislocations et assurer l'équilibre des contraintes internes, contredisant une croyance à l'époque assez répandue.

Les CLP ont été introduites avec succès dans mM par Madec [Madec 2001]. Toutefois, il a été suggéré assez tôt que leur utilisation induit des problèmes de corrélations spatiales, comme l'auto-annihilation après quelques renvois d'une dislocation avec son image, ou l'auto-interaction dipolaire, sur laquelle nous reviendrons par la suite. Travailler sur un volume de simulations orthorhombique, et non plus cubique, est une solution simple pour augmenter le nombre de renvois, et ainsi retarder l'auto-annihilation [Madec 2001]. Mais en augmentant le nombre de renvois possibles, la distance entre les plans de renvois est réduite et peut conduire à des interactions dipolaires, qui seront d'autant plus fortes que la dislocation et son image seront à proximité. Dans le cas de la structure CC, les problèmes d'auto-annihilation se posent rapidement. Comme le montre la figure II.5, les dislocations quittant la boîte de simulation sont directement réintroduites dans le même plan, puisque les plans de glissement  $\{110\}$  sont orthogonaux aux faces  $\{100\}$  du volume simulé. Deux solutions sont envisageables afin de décaler le plan de renvois du plan initial de la dislocation [Madec *et al.* 2003], soit par rotation du cristal, soit par translation des volumes images par rapport au volume de simulation. Cette seconde approche est relativement difficile à mettre en œuvre. C'est pourquoi le choix s'est porté ici sur la rotation des plans de glissement. En pratique cette idée revient à appliquer une matrice de rotation à tous les vecteurs décrivant l'espace, autrement dit la BVD. La solution

proposée doit toutefois répondre à une contrainte imposée par le code mM. Les vecteurs de discrétisation doivent conserver leurs composantes entières après rotation. Généralement, une rotation seule ne permet d'assurer cette condition, et donc une homothétie doit lui être associée.

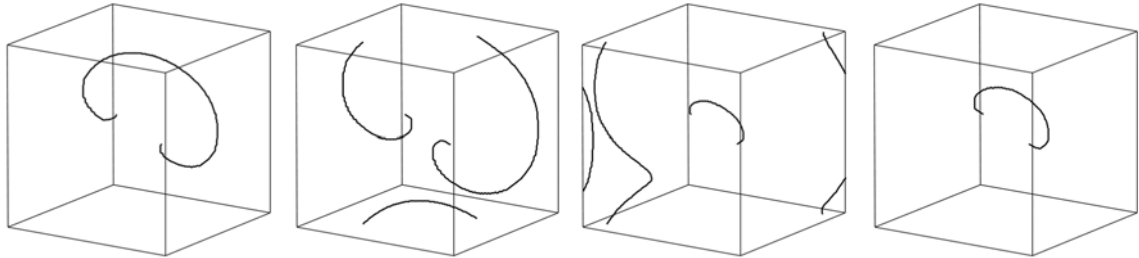


Figure II.5. Auto-annihilation d'une source de Frank-Read de caractère initialement vis. La première annihilation a lieu au bas de la boîte de simulation, puis une seconde entre les deux points d'ancrage et la dernière a lieu sur la gauche. En définitive, il ne reste plus rien de la boucle émise par la source.

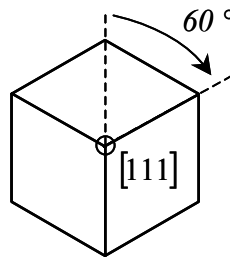


Figure II.6. Schématisation de la rotation remarquable de  $60^\circ$  d'axe  $[111]$  dans la structure CC.

L'idée de départ est de considérer en premier lieu, les rotations remarquables de la structure CC. Parmi elles, la rotation de  $60^\circ$  autour d'un axe  $\langle 111 \rangle$  fait permuer les trois empilements ABC de la projection selon le même axe  $\langle 111 \rangle$ . Elle est illustrée en figure II.6. Une homothétie d'un facteur trois permet de conserver les composantes des vecteurs de discrétisation entières. En guise d'exemple, considérons la rotation autour de l'axe  $[111]$ . Au finale, la matrice de transformation  $\underline{\underline{M}}$  correspondante (rotation et homothétie) est donnée en équation II.5 :

$$\underline{\underline{M}} = \begin{bmatrix} 2 & -1 & 2 \\ 2 & 2 & -1 \\ -1 & 2 & 2 \end{bmatrix} \quad \text{Équation II.5}$$

Les axes  $\langle 111 \rangle$  présentent l'inconvénient d'appartenir à trois plans  $(1\bar{1}0)$ ,  $(10\bar{1})$  et  $(01\bar{1})$ , qui sont après rotation, seulement permutés entre eux. Il subsiste donc six systèmes de glissement dont les plans sont orthogonaux aux faces du volume simulé. Pour remédier à cela, une seconde rotation de même nature peut être envisagée, par exemple autour de l'axe  $[\bar{1}11]$ . Une seconde homothétie d'un facteur trois est à nouveau nécessaire. La matrice de transformation  $\underline{\underline{N}}$  totale

est donnée en équation II.6 :

$$\underline{\underline{N}} = \begin{bmatrix} -1 & -8 & 4 \\ 8 & 1 & 4 \\ -4 & 4 & 7 \end{bmatrix} \quad \text{Équation II.6}$$

Malgré cette seconde rotation, le plan (110) reste orthogonal à la face (001) du volume de simulation. Une troisième rotation autour d'un dernier axe  $\langle 111 \rangle$  peut bien évidemment être envisagée. Mais en pratique cela ne sera pas nécessaire, on choisira les directions de sollicitations de telle sorte que les systèmes susceptibles de poser problème ne soient pas actifs.

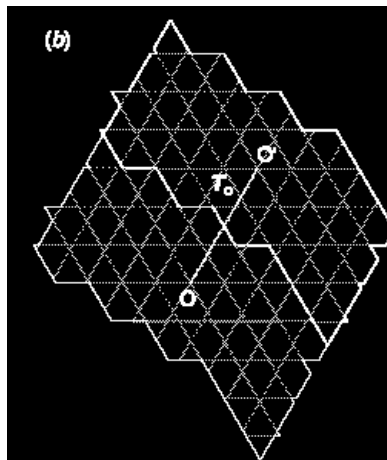


Figure II.7. Exemple de pavage des différentes intersections entre le plan de glissement avec le réseau périodique des volumes images, d'après [Madec *et al.* 2003]

L'auto-annihilation directe est donc évitée de cette manière, mais elle se produit inévitablement après un certain parcours des dislocations. Ce moment peut être retardé par l'utilisation d'une boîte de simulation orthorhombique. La détermination du parcours avant auto-annihilation est un problème complexe, qui fait intervenir la géométrie du glissement, les différentes dimensions du volume de simulation, et la direction de déplacement du segment de dislocation. Plusieurs auteurs proposent des méthodes pour résoudre ce problème qui se réduit à un jeu d'équations diophantiennes [Monnet *et al.* 2004, Madec *et al.* 2003]. Madec [Madec *et al.* 2003] propose une méthode numérique intéressante, pour définir les différentes distances de première auto-annihilation dans toutes les directions de propagation d'une dislocation. Autrement dit, il définit le plan de glissement étendu d'une boucle de dislocation qui se propage de manière isotrope, il correspond au pavage des différentes intersections entre le plan de glissement avec le réseau périodique des volumes images (*cf.* figure II.7). Ceci fait apparaître un second critère relatif au choix des dimensions du volume de simulation : non seulement la distance d'auto-annihilation doit être relativement grande mais elle est également souhaitée isotrope suivant le caractère de la dislocation.

Les dimensions des volumes de simulations utilisées dans ce travail, ont été définies en trois étapes. Dans un premier temps, les distances d’auto-annihilation sont calculées pour les caractères vis et coin en suivant la formulation proposée dans [Monnet *et al.* 2004], puis l’aspect isotrope du plan de glissement étendu est vérifié à l’aide des outils de Madec. Enfin, ces calculs sont complétés par la simulation de l’extension d’une source de Frank-Read.

### II.3. Tests élémentaires de validation

Le fonctionnement des sources de Frank-Read est l’un des plus vieux problèmes de dislocations. Les travaux qui en ont découlé ont d’ailleurs conduit à des résultats originaux tels que la formulation de la tension de ligne proposée par De Wit et Koehler [De Wit et Koehler 1959] ou la notion de self-stress définie par Brown [Brown 1964]. Ces configurations relativement simples ont également permis de discuter la forme d’équilibre des dislocations soumises à un chargement [Foreman 1967, Hazzledine et al 1984, Schmid et Kirchner 1988, Mughrabi 2001].

Tableau II.1. Rappel des principaux paramètres matériaux utilisés. Ce sont ceux utilisés tout au long de ce travail, sauf dans certains cas qui seront précisés.

$\mu$	$b$	$T$	$\nu$	Coefficient $B$	$\tau_F$
83,6 GPa	$2,48 \cdot 10^{-10}$ m	300 K	0,33	$10^{-4}$ Pa.s	30 MPa

L’étude de ce type de configuration est désormais un exercice classique des simulations de DD, qui est notamment utilisé comme étape de validation [Devincre 1994, Madec 2001, Gómez-García *et al.* 1999, Moulin et al. 1997, Faradjian *et al.* 1999]. Cet intérêt s’explique à la fois par la facilité de mise en œuvre, la courte durée des simulations mais aussi par l’existence de modèles analytiques bien acceptés. Dans le cadre de ce travail, une étude de ce type est doublement motivée : (i) pour vérifier que l’utilisation d’une base asymétrique de discrétisation n’affecte pas la description de la courbure des dislocations et n’induit pas d’artefact, et (ii) pour définir les plages de validité des paramètres de simulation, en particulier ceux associés à la discrétisation de l’espace et du temps. Le tableau II.1 regroupe les paramètres matériaux relatifs à la ferrite de notre travail. A chaque fois que cela est possible, la comparaison sera recherchée avec les résultats de Madec [Madec 2001] obtenus avec le même code mais dans le cas d’un matériau CFC, et une base de discrétisation symétrique.

#### II.3.1. Influence de la longueur de la source

Foreman [Foreman 1967] a déterminé la contrainte d’activation et la forme critique d’une source de Frank-Read en faisant varier le caractère, la longueur et l’environnement de la source.

L'environnement réfère à l'existence et à la configuration de bras, c'est-à-dire la présence de connections avec d'autres dislocations de part et d'autre des points d'ancrage. Pour cela, à chaque incrément de contrainte appliquée la dislocation, qui est discrétisée par des segments, se relaxe jusqu'à sa position d'équilibre. Foreman définit alors la contrainte d'activation sous la forme donnée en équation II.7 :

$$\tau_c = \frac{A}{2\pi} \frac{\mu b}{L} \left[ \ln \left( \frac{L}{r_0} \right) + C \right] \quad \text{Équation II.7}$$

$L$  est la longueur initiale de la source de Frank-Read. Le coefficient  $A$  dépend du caractère initial de la source. Il prend la valeur de  $1/(1-\nu)$  pour une source vis et il vaut 1 pour une coin. Le coefficient  $C$  rend compte de l'environnement de la source et notamment de la présence et de la configuration des bras, qui interagissent avec la source. Ce terme dont l'influence est, il est vrai, assez faible, est souvent négligé à tort. Il dépend par ailleurs également du caractère initial de la source.  $r_0$  est le rayon de coupure inférieur, il est généralement pris comme la norme du vecteur de Burgers. Gómez-García discute dans ses travaux la valeur de  $r_0$  et conclut qu'il doit être pris comme  $2b$  [Gómez-García *et al.* 1999]. Mais ceci n'a pas de réelle importance puisque le choix de la valeur  $r_0$  est compensé par la valeur que doit prendre  $C$  pour rester en accord avec les résultats obtenus par Foreman.

Des simulations de DD sont réalisées dans l'objectif de retrouver la formulation de la contrainte d'activation obtenue par Foreman. Une source de Frank-Read, dépourvue de bras, est introduite dans une boîte de simulation. La déformation est réalisée à une vitesse suffisamment faible pour supposer que le chargement est quasi-statique, et ainsi rester cohérent avec les calculs statiques réalisés par Foreman. L'influence du caractère initial de la source est également considérée. La boîte de simulation est choisie suffisamment grande pour que les interactions avec les dislocations images soient négligeables devant la contrainte d'activation de la source. Typiquement le volume de simulation est choisi comme quatre fois la longueur de la source. Le domaine de longueur initiale  $L$  exploré s'étend de  $100$  à  $10^5 b$ , et reprend celui étudié par Foreman. La longueur de discrétisation  $\lambda$ , dont la valeur sera discutée dans le paragraphe suivant, est fixée à un dixième de la longueur initiale de la source  $L$ . La figure II.8 regroupe l'ensemble des résultats obtenus et les compare aux valeurs obtenues par Madec et au modèle de Foreman. Le coefficient  $C$  qui intervient dans ce dernier a été calculé à partir des courbes du travail de Foreman concernant l'environnement identique à celui des simulations de DD, autrement dit sans la présence de bras aux points d'ancrage.  $B$  prend alors la valeur de  $0,21$  pour une source de caractère initialement vis et de  $0,6$  pour une coin.  $r_0$  est pris comme égale à  $b$ .

La contrainte d'activation obtenue par simulation de DD est en très bon accord avec la formulation proposée par Foreman, qui met en jeu la longueur  $L$  dans le terme logarithmique comme le montre la figure II.8. Cet accord est valable sur trois ordres de grandeur en terme de

longueur de source. Autrement dit, la contrainte d'équilibre définie par les simulations de DD est valable quelle que soit la longueur de la source, que l'on peut assimiler à une dimension caractéristique. La précision obtenue lors des simulations actuelles de DD est par ailleurs du même ordre que celle obtenue par Madec avec une base de discrétisation symétrique. La différence moyenne constatée entre nos résultats et la relation de Foreman est de l'ordre de 3 à 4 %. Cette valeur constitue une estimation schématique de l'erreur sur l'état mécanique qui est introduite par la discrétisation des lignes dans les simulations de DD.

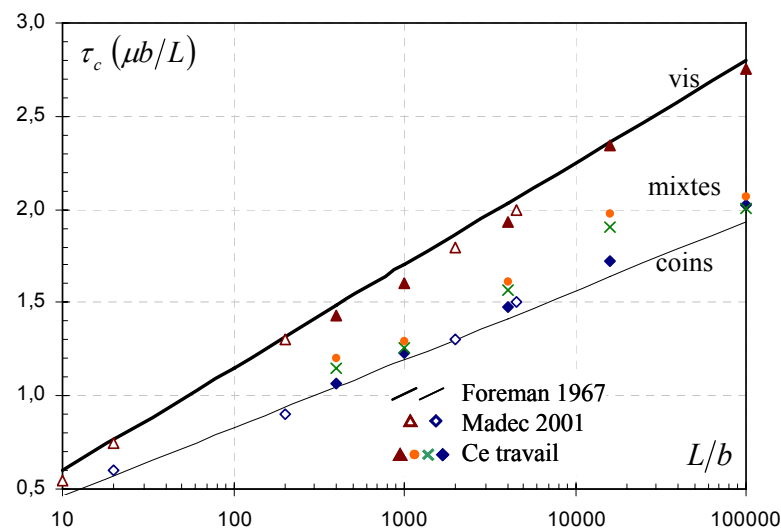


Figure II.8. Influence de la longueur et du caractère initial sur la contrainte d'activation d'une source de Frank-Read. Les triangles correspondent aux sources vis, les losanges aux coins et les cercles et croix à des caractères mixtes. La relation proposée par Foreman [Foreman 1967] et les résultats obtenus par Madec [Madec 2001] sont reportés.

### II.3.2. Influence de la longueur de discrétisation

La longueur de discrétisation est un paramètre clef dans les simulations de DD quelles qu'elles soient. D'une part elle conditionne la précision avec laquelle la courbure des dislocations est décrite. Et d'autre part, elle détermine le nombre de segments évoluant au cours des simulations, nombre qu'il faut relier au temps de calcul. Pour réaliser l'étude de la sensibilité des simulations sur ce paramètre, les conditions utilisées par Madec [Madec 2001] sont reprises, à savoir, une source de caractère vis ou coin d'une longueur de  $4500 b$ . La figure II.9 reprend les résultats des simulations de DD, ceux obtenus par Madec et l'expression proposée par Foreman.

A nouveau les résultats obtenus par la DD sont en bon accord avec le modèle proposé par Foreman, et sur un domaine de longueurs de discrétisation qui s'étend de  $\lambda/L = 0,04$  à presque

0,5. La fidélité à l'expression de Foreman est identique à celle obtenue par les simulations de Madec, la figure suggère d'ailleurs que des longueurs de discrétisation plus grandes peuvent être envisagées avec le code actuel (notamment concernant les sources vis). Effectivement des efforts récents ont permis, dans certaines configurations, de réduire le nombre de segments nécessaires, par exemple concernant la description des dislocations faiblement courbées. Mais dans le même temps la définition de la longueur de discrétisation a évolué en comparaison de celle utilisée par Madec. On retiendra simplement que des discrétisations de l'ordre de  $L/3$  peuvent être utilisées tout en décrivant correctement la forme des dislocations et le champ de contraintes qui lui est associé.

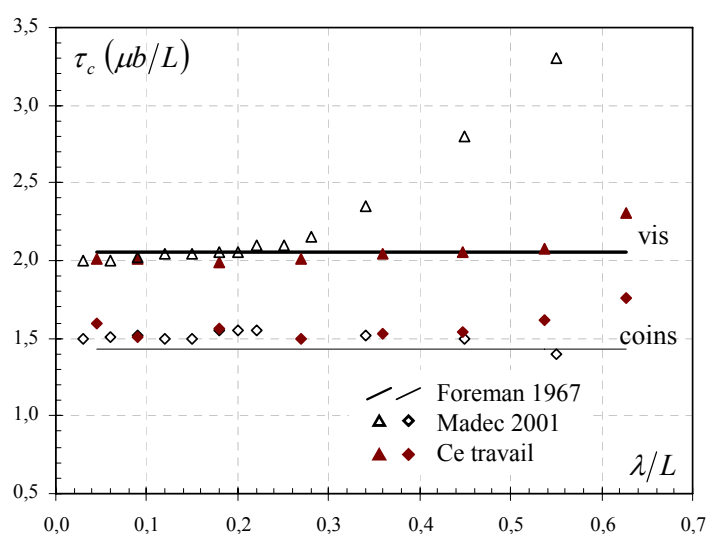


Figure II.9. Influence de la longueur de discrétisation  $\lambda$  sur la contrainte d'activation d'une source. Les résultats de Madec sont reportés dans la figure à l'aide des marques vides [Madec 2001]. Les lignes reprennent les valeurs issues de la relation de Foreman [Foreman 1967].

De Wit et Koehler [De Wit et Koehler 1959] ont été parmi les premiers à étudier la forme d'équilibre des sources de Frank-Read en tenant compte de la dépendance en orientation de la tension de ligne. Ils montrent que la forme est proche d'une ellipse allongée suivant l'orientation du vecteur de Burgers. Le ratio entre les deux axes de cette ellipse est souvent discuté. Il varie suivant la démarche adoptée [Schmid et Kirchner 1988, Hazzledine *et al.* 1984] et a été comparée à des résultats expérimentaux bien qu'il semble difficile d'obtenir la précision suffisante au MET [Mughrabi 2001]. Scattergood et Bacon [Scattergood et Bacon 1974] montrent également que la taille initiale de la source influe sur sa forme critique qui est moins elliptique, plus circulaire, quand la taille de la source est diminuée. Il ne semble pas pertinent de discuter le détail des formes adoptées par les dislocations lors de simulations. Par contre il est intéressant de discuter la description de la courbure des dislocations à l'aide d'une base



asymétrique (*cf.* figure II.10). Pour bien mettre en évidence la discrétisation, la longueur de discrétisation est prise comme  $L/3$ . A première vue les formes adoptées par les sources sont des ellipses symétriques, toutefois la discrétisation est différente de part et d'autre de la source. Autrement dit le nombre et la longueur des segments ne sont pas les mêmes si la courbure est discrétisée à partir de grands segments mixtes 1 ou 2 (*cf.* figure II.2). Mais bien évidemment cet effet disparaît lorsque la longueur de discrétisation est réduite.

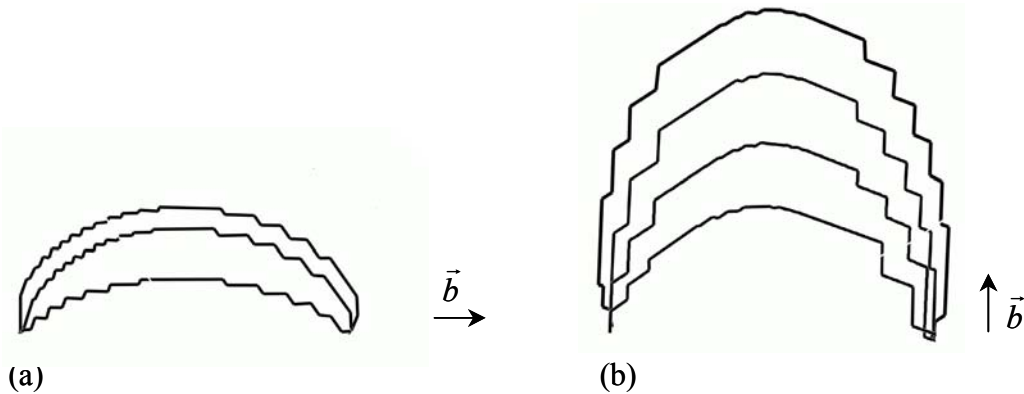


Figure II.10. Différentes formes adoptées avant l'activation d'une source initialement vis (a) et une source coin (b). La longueur de discrétisation est prise comme  $L/3$ . La forme générale reste symétrique alors que la discrétisation est différente de part et d'autre de la source.

### II.3.3. Influence du pas de temps

Le pas de temps associé à la loi de mobilité définit l'amplitude de déplacement par pas de simulations. Il s'agit donc d'un paramètre important. Dans le but de vérifier la sensibilité des simulations sur ce paramètre, les conditions de simulations utilisées par Madec sont reprises. La source de caractère vis présente une longueur de  $5 \mu\text{m}$ . La longueur de discrétisation est fixée à  $\lambda/L = 1/5$ . Le domaine de pas de temps  $\Delta t$  envisagés s'étend de  $10^{-11}$  à  $10^{-7}$  s. La figure II.11 présente la dépendance de la cission critique en fonction du pas de temps obtenue par Madec, et les résultats obtenus dans ce travail dans les mêmes conditions.

La contrainte critique est bien reproduite pour des pas de temps couvrant un domaine de  $10^{-11}$  à  $10^{-8}$  s, étendue qui est identique à celle obtenue par Madec. Pour les pas de temps supérieurs à  $10^{-8}$  s, la contrainte critique est sous estimée. Les déplacements sont sur évalués, la configuration des segments devient instable, ce qui aboutit à une activation prématurée de la source. Cette figure ne signifie évidemment pas que le pas de temps des simulations qui vont suivre, pourra être pris de l'ordre de  $10^{-9}$  s. Le pas de temps doit en effet être adapté au problème considéré.

En revanche, on retiendra de ces trois séries de tests, que l'adaptation du code mM à une

structure CC, et notamment l'utilisation d'une base asymétrique ne semble pas poser de problème. Elle ne modifie pas non plus, les domaines de validité des paramètres de la simulation qui avaient été obtenus par le passé.

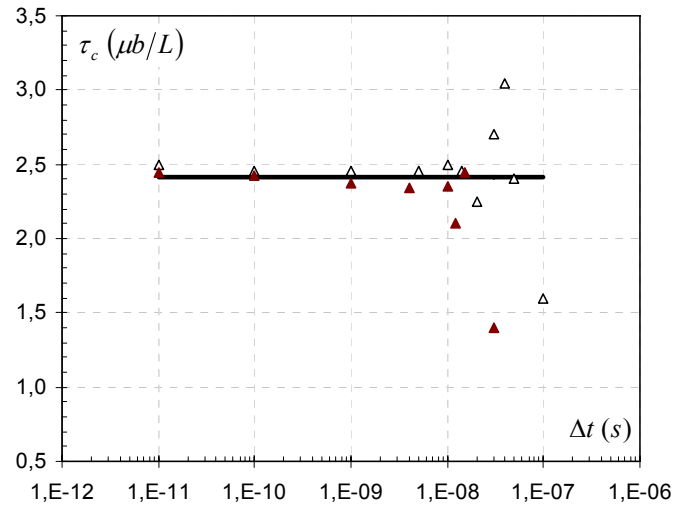


Figure II.11. Influence du pas de temps sur la contrainte d'activation d'une source vis d'une longueur de 5  $\mu m$ . Les valeurs obtenus dans ce travail sont comparées à celle obtenues par Madec dans les mêmes conditions [Madec 2001], ainsi qu'au modèle proposé par Foreman [Foreman 1967].

## Résumé

---

Le code de DD utilisé microMégas, présente la particularité de discrétiser l'espace et le temps. Les dislocations sont discrétisées à l'aide de huit vecteurs différents par système de glissement qui constituent une base de discrétisation. Parmi ces vecteurs, on retrouve les directions vis et coin ainsi que les directions d'intersection entre chaque système. Pour la première fois, la base de discrétisation est asymétrique.

Les grandes lignes du fonctionnement de ce code ont été introduites. En particulier la loi de mobilité qui prédit le déplacement des segments en fonction de la contrainte effective qui leur est appliquée est prise comme linéaire. Elle fait également intervenir la contrainte de friction d'alliage qui agit comme un seuil au déplacement des segments. Un critère simple de déviation des segments vis est proposé pour reproduire l'aspect facile du glissement dévié dans le fer. Un segment vis peut changer de plan de glissement dès lors que la contrainte effective dans un des plans de déviation est supérieure à celle dans le plan initial.

La validation de l'utilisation d'une base de discrétisation asymétrique et les modifications de microMégas pour travailler sur une structure CC, ont été validées au travers de l'étude du fonctionnement d'une source de Frank-Read. La forme critique de la source est bien reproduite. Les valeurs de la contrainte d'activation obtenues par la DD sont en bon accord avec le modèle proposé par Foreman. Et ceci reste vrai quelle que soit la taille de la source que l'on peut rapprocher d'une dimension caractéristique.

Ces premières simulations sont également l'occasion de définir les domaines de validité de deux paramètres importants de la simulation, la longueur de discrétisation et le pas de temps. La différence avec le modèle analytique ainsi que les plages d'utilisation des paramètres sont du même ordre que ceux obtenus avec une base symétrique dévolue à la structure CFC.

---

## Bibliographie

- [Bacon *et al.* 1973] D. J. Bacon, U. F. Kocks, R. O. Scattergood, *Phil. Mag.* **28**,1241 (1973).
- [Brown 1964] L. M. Brown. *Phil. Mag.* **10**, 441 (1964).
- [Brown et Ham 1971] L. M. Brown, Ham dans A. Kelly and R.B. Nicholson, éditeurs, *Strengthening Methods in Solids*, Applied Science Publishers, Barking, Essex (1971).
- [Bulatov *et al.* 2001] V. V. Bulatov, M. Rhee, and W. Cai, *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.* **653**, Z1.3.1 (2001).
- [Bulatov *et al.* 2006] V. V. Bulatov, L. L. Hsiung, M. Tang, A. Arsenlis, M. C. Bartelt, W. Cai J. N. Florando, M. Hiratani, M. Rhee, G. Hommes, T. G. Pierce. T. Diaz de la Rubia, *Nature* **440**, 1174 (2006).
- [De Wit 1967] R. De Wit, *Phys. Stat. Sol.* **20**, 575 (1967).
- [De Wit et Koehler 1959] G. De Wit, J. S. Koehler, *Phys. Rev.* **116**, 1113 (1959).
- [Devincre 1994] B. Devincré, Thèse de doctorat de l'Université de Paris XI (1994).
- [Devincre 1995] B. Devincré, *Sol. State Comm.* **93**, 875 (1995).
- [Devincre 2005] B. Devincré, HDR de l'Université de Paris XI (2005).
- [Devincre *et al.* 2003] B. Devincré, A. Roos, and S. Groh. Boundary problems in DD simulations. In A. Finel, D. Mazière, et M. Véron, editeurs, *Thermodynamics, Microstructures and Plasticity*, 275, Dordrecht, NATO Science Series, Kluwer Academic Publishers (2003).
- [Devincre *et al.* 2006] B. Devincré, L. Kubin, T. Hoc, *Scripta Mat.* **54**, 741 (2006).
- [Domain et Monnet 2005] C. Domain, G. Monnet, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 215506 (2005).
- [Escaig 1968] B. Escaig, *Phys. Stat. Sol.* **28**, 463 (1968).
- [Faradjian *et al.* 1999] A.K. Faradjian, L.H. Friedman, D.C. Chrzan, *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* **7**, 479 (1999).
- [Fivel *et al.* 1998] M. C. Fivel, C. F. Robertson, G. R. Canova, L. Boulanger, *Acta Mater.* **46**, 6183 (1998).
- [Foreman 1967] A. J. E. Foreman, *Phil. Mag.* **15**, 1011 (1967).
- [Foreman et Makin 1966] A. J. E. Foreman, M. J. Makin, *Phil. Mag.* **13**, 911 (1973).
- [Franciosi 1983] P. Franciosi, *Acta Metall.* **31**, 1331 (1983).
- [Frederiksen et Jacobsen 2003] S. L. Frederiksen, K. W. Jacobsen, *Phil. Mag.* **83**, 365 (2003).
- [Friedel 1964] J. Friedel, dans "Dislocations", London, Pergamon Press, 350 (1964).
- [Ghosh et Olson 2002] G. Ghosh, G. B. Olson, *Acta Mater.* **50**, 2655 (2002).
- [Gómez-García *et al.* 1999] D. Gómez-García, B. Devincré, L. Kubin, *J. Comp. Aided Mat.*

- Design **6**, 157 (1999).
- [Hazzledine *et al.* 1984] P. M. Hazzledine, H. P. Kernthaler, A. Korner, Phys. Stat. Sol. a **81**, 473 (1984).
- [Keh 1964] A. S. Keh, Phil. Mag. Ser. **8**, **12**, 9 (1964).
- [Lavrentev 1980] F. F. Lavrentev, Mat. Sci. Eng. **46**, 191 (1980).
- [Lefebvre *et al.* 2006] S. Lefebvre, B. Devincere, T. Hoc, J. Mech. Phys. Sol. **55**, 788 (2007).
- [Lemarchand *et al.* 2001] C. Lemarchand, B. Devincere, L.P. Kubin, J. Mech. Phys. Solids **49**, 1969 (2001).
- [Madec 2001] R. Madec, Thèse de doctorat de l'Université de Paris XI (2001).
- [Madec *et al.* 2002] R. Madec, B. Devincere, L.P. Kubin, Comp. Mat. Sci. **23**, 219 (2002).
- [Madec *et al.* 2003] R. Madec, B. Devincere, L. Kubin, "Mesoscopic Dynamics in Fracture Process and Strength of Materials", Y. Shibutani, H. Kitagawa, Eds (Kluwer, NL-Dordrecht) (2003).
- [Mathieu 2006] J.P. Mathieu, Thèse de doctorat de l'École Nationale Supérieure d'Art et Métiers (2006).
- [Mohles 2001] V. Mohles, Phil. Mag. A **81**, 971 (2001).
- [Monnet 2006] G. Monnet, Phil. Mag. **86**, 5925 (2006).
- [Monnet *et al.* 2004] G. Monnet, B. Devincere, L. P. Kubin, Acta Mater. **52**, 4317 (2004).
- [Monnet et Devincere 2006] G. Monnet, B. Devincere, Phil. Mag. **86**, 1555 (2006).
- [Monnet et Queyreau 2005] G. Monnet, S. Queyreau, rapport EDF HT-27/05/045/A (2005).
- [Mughrabi 2001] H. Mughrabi, Mat. Sci. Eng. **A309-310**, 237 (2001).
- [Naamane *et al.* 2006] S. Naamane, G. Monnet, B. Devincere, "Characterization of a velocity law at low temperature for screw dislocations in iron", Conférence Plasticity, Canada (2006).
- [Nembach 1996] E. Nembach, dans "Particle strengthening of metals and alloys", New York, Wiley (1996).
- [Nicola *et al.* 2003] L. Nicola, E. Van der Giessen, A. Needleman. J. Appl. Phys. **93**, 5920 (2003).
- [Okazaki 1996] K. Okazaki, J. Mater. Sci. **31**, 1087 (1996).
- [Osetsky et Bacon 2003] Y.N. Osetsky, D.J. Bacon, J. Nucl. Mater. **323**, 268 (2003).
- [Pareige 1994] P. Pareige, Thèse de doctorat de l'Université de Rouen (1994).
- [Peach et Koehler 1950] M. Peach, J. S. Koehler, Phys. Rev. **80**, 436 (1950).
- [Picu 2004] R. C. Picu, Acta Mater. **52**, 3447 (2004).
- [Rhee *et al.* 1998] M. Rhee, H. M. Zbib, J. P. Hirth, H. Huang, T. de la Rubia, Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. **6**, 467 (1998).

- [Rhee *et al.* 2000] M. Rhee, J. S. Stolken, V. V. Bulatov, T. Diaz de la Rubia, N. Zbib, J. P. Hirth, *Mater. Sci. Eng.* **A309-310**, 288 (2001).
- [Rickman *et al.* 2002] J. M. Rickman, R. LeSar, D. J. Srolovitz, *Acta Mater.* **51**, 1199 (2003).
- [Saada 1964] G. Saada, *Acta Metall.* **8**, 841 (1960).
- [Scattergood et Bacon 1974] R.O. Scattergood, D.J. Bacon, *Phys. Stat. Sol. a* **25**, 395 (1974).
- [Schmid et Kirchner 1988] H. Schmid, H. O. K Kirchner, *Phil. Mag. A* **58**, 905 (1988).
- [Schwarz 1999] K.W. Schwartz, *J. Appl. Phys.* **85**, 108 (1999).
- [Schwarz et Tersoff 1996] K. Schwarz, J. Tersoff, *Appl. Phys. Lett.* **69**, 1220 (1996).
- [Shin *et al.* 2005] C. S. Shin, M. C. Fivel, M. Verdier, C. Robertson, *Mat. Sci. Eng.* **A400-401**, 166 (2005).
- [Spitzig et Keh 1970] W. A. Spitzig, A. S. Keh, *Metall. Trans.* **1**, 2751 (1970).
- [Takeuchi 1968] T. Takeuchi, *Trans. ISIJ* **8**, 251 (1968).
- [Takeuchi *et al.* 1967] S. Takeuchi, E. Furubayashi, T. Taoka, *Acta Metall.* **15**, 1179 (1967).
- [Tang *et al.* 1998] M. Tang, L. P. Kubin, G. R. Canova, *Acta Mater.* **46**, 3221 (1998).
- [Tapasa *et al.* 2006] K. Tapasa, Yu. N. Osetsky, D. J. Bacon, *Acta Mater.* **55**, 93 (2006).
- [Urabe et Weerman 1975] N. Urabe, J. Weerman, *Mat. Sci. Eng.* **18**, 41 (1975).
- [Van der Giessen et Needleman 1995] E. Van der Giessen, A. Needleman, *Simul. Mater Sci. Eng.* **3**, 689 (1995).
- [Verdier *et al.* 1998] M. Verdier, M. Fivel, I. Groma, *Model. Simul. Mater. Sci. Eng.* **6**, 755 (1998).

---

## CHAPITRE III. DURCISSEMENT ASSOCIE AUX INTERACTIONS ENTRE DISLOCATIONS

---

<b>Introduction</b>	<b>65</b>
<b>III.1. Rappels bibliographiques sur le mécanisme de la forêt</b>	<b>66</b>
III.1.1. Les différentes interactions entre les systèmes de plans {110}	68
III.1.2. Les travaux portant sur une jonction individuelle	70
III.1.3. Autres approches visant à définir les coefficients d'interaction	72
III.1.4. Détermination des coefficients d'interaction par simulations de DD	73
<b>III.2. Etude du mécanisme de la forêt par simulations de DD</b>	<b>77</b>
III.2.1. Etude de sensibilité aux paramètres de simulations	78
III.2.2. Détermination des coefficients d'interaction	82
III.2.3. Validation : simulation du glissement double	91
<b>Résumé</b>	<b>99</b>
<b>Bibliographie</b>	<b>100</b>

---

### Introduction

Au cours de ce chapitre nous abordons ce qui fut l'un des premiers problèmes physiques traités par des simulations de DD : le durcissement associé aux interactions entre dislocations sécantes, ou forêt. Pour débiter, une revue des différents travaux de la littérature est proposée afin de définir les ingrédients nécessaires à une bonne description de ce mécanisme complexe. Les différentes interactions entre les systèmes de plan {110} sont ensuite présentées. Le durcissement de la forêt est étudié à l'aide de simulations de DD. Il s'agit en particulier de définir les coefficients d'interaction, paramètres clefs d'un modèle de plasticité cristalline adapté à la ferrite des aciers de cuve.

Une étude de la sensibilité est réalisée en premier lieu pour définir avec soin les paramètres

des simulations. L'influence de la friction d'alliage est discutée. La comparaison est recherchée avec la seule étude de ce genre qui existe dans la littérature. Enfin l'aspect prédictif de la loi de plasticité proposée pour rendre compte du durcissement de la forêt est testé au travers de la simulation d'un essai de traction en glissement double.

### III.1. Rappels bibliographiques sur le mécanisme de la forêt

Il a été compris assez tôt, que dans le domaine athermique, le comportement plastique du monocristal est essentiellement associé aux interactions entre dislocations glissant sur des plans sécants [Saada 1960, Friedel 1961]. Parmi elles, les interactions attractives jouent un rôle tout particulier, en donnant lieu à des réactions ou recombinaisons entre dislocations et à la formation de nouvelles lignes, appelées jonctions. Ces réactions réduisent de manière significative l'énergie du système et ancrent plus ou moins fortement le réseau de dislocations puisque les jonctions sont généralement sessiles. Ainsi, l'écoulement plastique se produit à la condition de vaincre la tension de ligne qui s'oppose à la courbure des dislocations entre deux réactions. C'est pourquoi, la contrainte d'écoulement fait intervenir l'inverse de la distance entre les réactions, qui elle-même est liée à la racine carrée de la densité de dislocations obstacles [Saada 1960]. Ceci conduit au célèbre modèle de la forêt qui relie la contrainte d'écoulement  $\tau_c$  à la densité de dislocations de la forêt  $\rho_f$ , donné en équation III.1 :

$$\tau_c = \alpha \mu b \sqrt{\rho_f} \quad \text{Équation III.1}$$

Dans cette équation  $\mu$  est le module de cisaillement et  $b$ , la norme du vecteur de Burgers. Elle fait apparaître  $\alpha$ , le coefficient d'interaction qui mesure l'intensité moyenne des interactions entre les dislocations.  $\alpha$  a été évalué expérimentalement de l'ordre de 0,3 dans la structure CC [Keh 1964, Lavrentev 1980] et nous en déterminerons une valeur plus loin dans ce chapitre. L'équation III.1 présente néanmoins des limitations. En particulier elle ne tient pas compte des réactions qui sont de natures et de propriétés variables suivant les systèmes de glissement mis en jeu lors des essais de déformation [Franciosi 1985]. C'est pour cette raison que la définition d'un coefficient d'interaction  $\alpha$  unique ne permet pas de rendre compte de l'anisotropie du comportement plastique du monocristal. Pour remédier à ceci, Franciosi [Franciosi 1985] a proposé une formulation superposant les différentes interactions qui surviennent entre les systèmes de dislocations :

$$\tau_c^i = \mu b \sqrt{\sum_j a^{ij} \rho^j} \quad \text{Équation III.2}$$

La cission critique  $\tau_c^i$  sur un système  $i$  fait dorénavant intervenir les densités  $\rho^j$  de tous les systèmes  $j$ . Ces dernières sont pondérées par des coefficients d'interaction  $a^{ij}$ , qui mesurent à



présent l'intensité de l'interaction entre les systèmes  $i$  et  $j$ . Cette relation est d'autant plus difficile à mettre en œuvre, que les coefficients d'interaction sont plus nombreux, et ces derniers n'ont été définis avec précision que récemment [Devincre *et al.* 2006, Madec et Kubin 2004b]. Beaucoup d'efforts ont été apportés pour assurer le lien entre la force d'une jonction individuelle et ces coefficients [Saada 1964, Schoeck et Frydman 1972, Dupuy et Fivel 2002]. Cet objectif n'a été que partiellement atteint, comme nous le verrons par la suite. En revanche, les travaux qui en ont découlé ont mis en avant l'influence de paramètres essentiels à la compréhension du mécanisme de la forêt. En outre, il faut signaler que la plupart de ces études ont porté sur la structure CFC. Une revue en est proposée un peu plus loin (*cf.* III.1.2).

Puisque dans l'équation III.2, la contrainte d'écoulement est associée aux seules densités de dislocations, l'écroutissage est lié à leur augmentation au cours de la déformation plastique [Mecking et Kocks 1981, Estrin et Mecking 1984, Rauch 1993, Kocks et Mecking 2003]. Plus précisément, l'évolution des densités se décompose en deux termes antagonistes : d'une part, un terme d'accumulation associé à l'immobilisation des dislocations par des obstacles, et d'autre part, un terme de restauration dynamique qui est associé à l'annihilation des dislocations mettant en jeu le glissement dévié. Le premier mécanisme est prépondérant au début de la déformation plastique. Puis la restauration dynamique devient significative et finit par équilibrer le stockage, conduisant à l'écroutissage quasi-nul observé à la fin des courbes de traction. Ainsi, l'évolution de la densité  $\rho^i$  du système  $i$ , avec cisaillement  $\gamma^i$  se décompose [Mecking et Kocks 1981, Teodosiu *et al.* 1993] :

$$\frac{d\rho^i}{d\gamma^i} = \frac{1}{\lambda^i b} - y_c \rho^i \quad \text{Équation III.3}$$

Les deux termes opposés se retrouvent au travers de cette relation. D'un côté, le taux de stockage qui fait apparaître le libre parcours moyen  $\lambda^i$ . Ce dernier peut être vu comme la distance parcourue par une quantité donnée de dislocations mobiles, pour produire une quantité équivalente de dislocations immobiles, *i.e.* bloquées par des obstacles. Il dépend à la fois de la nature des interactions et de la densité des systèmes qui s'opposent au glissement de  $i$ . La restauration dynamique fait quant à elle apparaître un facteur  $y_c$  appliqué sur la densité de dislocations  $\rho^i$ . Il traduit la probabilité de rapprochement d'une paire de dislocations, à une distance suffisante pour que le glissement dévié se produise et soit à l'origine d'une annihilation.  $y_c$  est dépendant de la température et de la vitesse de sollicitation [Kocks et Mecking 2003].

La discussion des évolutions des densités sur les systèmes actifs, nécessite de disposer d'informations suffisantes en terme de statistiques. Autrement dit, ceci requiert à la fois de pouvoir explorer des déformations plastiques importantes et des multiplications significatives sur chacun des systèmes. Cela semble encore difficile à l'aide des simulations DD actuelles. Du

reste, les tailles réduites des volumes simulés posent aussi problème, dans la mesure où le libre parcours moyen peut être considérablement plus grand. Néanmoins des travaux sont actuellement menés sur ce sujet, notamment par Devincere et Kubin [Devincere et Kubin 2007]. En revanche, nous verrons à la fin de ce chapitre qu'il est possible d'estimer le libre parcours, moyennant des hypothèses simplificatrices.

Enfin, et pour être tout à fait complet, il faut rappeler les limitations d'un modèle de plasticité cristalline tel qu'il est introduit ici. La microstructure des dislocations est décrite à partir de la seule densité de dislocations qui est une information globale. Ce type de modèle est bien adapté à des modes de chargement pour lesquels l'organisation des dislocations n'affecte pas, ou peu, l'écoulement plastique [Kocks et Mecking 2003, Sevillano 1985]. C'est le cas des chargements monotones. En revanche, il n'est pas possible de rendre compte de cette manière de l'effet Bauschinger, par exemple. Il existe dans la littérature des modèles plus appropriés [Prinz et Argon 1984, Sevillano 1985] qui distinguent les densités de dislocations à l'intérieur des cellules de celles qui s'accumulent dans les parois.

### III.1.1. Les différentes interactions entre les systèmes de plans {110}

Pour simplifier, les douze systèmes {110} sont numérotés suivant l'indexation donnée en tableau III.1. Les interactions entre les systèmes de la structure CC peuvent être classées suivant les propriétés géométriques de la réaction qui se produit. Ainsi les interactions entre les douze systèmes de plans {110} se réduisent au nombre de six. Considérons par exemple le premier système  $\frac{1}{2} [1\bar{1}1]$  (110) dont les réactions avec tous les autres systèmes sont regroupées dans le tableau III.2.

Il existe deux interactions sans contact, nommées ainsi puisque les plans de glissement ne s'intersectent pas. La première est l'auto-interaction du premier système, aussi appelée interaction dipolaire de par la formation de dipôles qui lui est associée. Elle est généralement réputée faible [Madec 2001, Devincere *et al.* 2006]. Mais nous reviendrons sur ce point par la suite. La seconde interaction sans contact est celle qui est coplanaire avec le système 7, elle présente un plan de glissement parallèle à celui du premier système. L'intersection avec les systèmes 2 et 3, qui ont le même vecteur de Burgers, conduit à l'annihilation des dislocations, c'est-à-dire à la disparition des sections intersectées. Elle se nomme interaction colinéaire. En outre, trois différentes jonctions peuvent être formées. Elles ont un même vecteur de Burgers  $\langle 100 \rangle$  mais se distinguent par leur caractère [Madec et Kubin 2005]. On définit pour cela l'angle  $\varphi$  entre le vecteur ligne  $\vec{l}_j$  et le vecteur de Burgers  $\vec{b}_j$  de la jonction. On introduit également les angles  $\theta_1$  et  $\theta_f$  entre le vecteur ligne de la jonction  $\vec{l}_j$  et respectivement les vecteurs de Burgers du premier système et du système  $f$  (*cf.* figure III.1). Par exemple, la

réaction entre le premier système et  $\frac{1}{2} [111] (0\bar{1}1)$  ( $n^{\circ}4$ ) donne lieu à une jonction de caractère mixte ( $\varphi = 54.7^{\circ}$ ). Elle est dite symétrique car les angles  $\theta_1$  et  $\theta_f$  sont égaux. Une seconde jonction mixte, est obtenue avec le système 5 :  $\frac{1}{2} [111] (10\bar{1})$  par exemple. Elle est cette fois asymétrique puisque  $\theta_1$  diffère de  $\theta_f$ . Enfin la dernière jonction est de caractère coin.

Tableau III.1. Numérotation des douze systèmes de plans  $\{110\}$  dans la structure CC.

Indice	Plan	$\vec{b}$	Indice	Plan	$\vec{b}$
1	(110)	$[1\bar{1}1]$	7	$(\bar{1}\bar{1}0)$	$[\bar{1}\bar{1}1]$
2	$(\bar{1}01)$	$[1\bar{1}1]$	8	(101)	$[\bar{1}\bar{1}1]$
3	$(0\bar{1}\bar{1})$	$[1\bar{1}1]$	9	$(01\bar{1})$	$[\bar{1}\bar{1}1]$
4	$(0\bar{1}1)$	$[111]$	10	$(1\bar{1}0)$	$[11\bar{1}]$
5	$(10\bar{1})$	$[111]$	11	$(\bar{1}0\bar{1})$	$[11\bar{1}]$
6	$(\bar{1}10)$	$[111]$	12	(011)	$[11\bar{1}]$

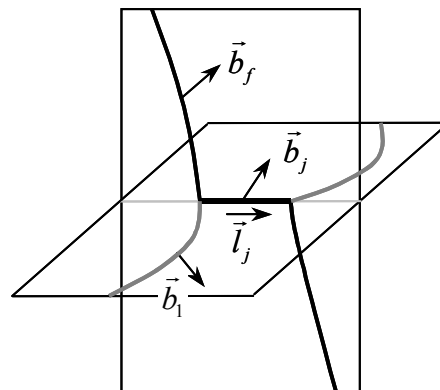


Figure III.1. Définition des notations utilisées pour les vecteurs ligne et de Burgers des systèmes interagissant et de la jonction.

On trouve dans [Madec et Kubin 2005] une analyse complète des différentes interactions tenant compte des systèmes de plans  $\{112\}$ . Sept configurations supplémentaires sont introduites par les interactions entre des systèmes de plans  $\{110\}$  et  $\{112\}$ , et quatre autres sont associées aux interactions entre deux systèmes de plans  $\{112\}$ .

Tableau III.2. Définition des différentes interactions entre les systèmes de glissement et le premier système  $\frac{1}{2} [1\bar{1}1]$  (110). Les angles entre le vecteur ligne  $\vec{l}_j$  de la jonction et les vecteurs de Burgers  $\vec{b}_j$  de chaque système sont donnés. Et  $\varphi$  est l'angle entre le vecteur ligne et de Burgers de la jonction. L'abréviation J. signifie jonction.

Interaction	Systèmes	$\vec{l}_j$	$\vec{b}_j$	$\theta_1$	$\theta_f$	$\varphi$
Dipolaire	1					
Colinéaire	2, 3	$[1\bar{1}1]$	$\vec{0}$			
J. mixte symétrique	4, 11	$[\bar{1}11]$	$[0\bar{1}0]$	70,5	70,5	54,7
J. mixte asymétrique	5, 8, 9 et 12	$[1\bar{1}1]$	$[0\bar{1}0]$	0	70,5	54,7
J. coin	6, 10	$[001]$	$[0\bar{1}0]$	54,7	54,7	90
Coplaire	7					

### III.1.2. Les travaux portant sur une jonction individuelle

Les premiers modèles analytiques étaient basés sur des simplifications géométriques du problème de la forêt. Il se réduit typiquement à l'interaction d'une dislocation mobile avec deux dislocations de la forêt. Saada [Saada 1964] est le premier à proposer ce type de configuration pour étudier la force d'une jonction de Lomer dans les matériaux de structures CFC. On trouve une présentation des différentes interactions des matériaux CFC dans [Hirth et Lothe 1982, Madec 2001]. Saada démontre le rôle des interactions attractives. Néanmoins ses calculs utilisent une tension de ligne qui ne tient pas compte de la dépendance en orientation de l'énergie de ligne, ce qui rend la jonction de Lomer indiscernable des autres jonctions du CFC [Dupuy et Fivel 2002]. Schoeck et Frydman [Schoeck et Frydman 1972] ont affiné la démarche proposée par Saada, en utilisant une tension de ligne dépendante de l'orientation. Néanmoins, ce type d'approche prend en compte de manière approchée les interactions entre dislocations à longue distance, et les procédures de moyennes demeurent difficiles.

L'arrivée des simulations à l'échelle atomique a permis la vérification de points jusqu'alors seulement supposés. Bulatov *et al.* [Bulatov *et al.* 1998] ont étudié la destruction d'une barrière de Lomer-Cottrell à l'aide de simulations de dynamique moléculaire. Ils vérifient ainsi que la stabilité des jonctions peut être traitée essentiellement de manière élastique. La destruction s'opère, en effet, par le dézippage d'un des bras de la jonction qui ne fait intervenir que peu les propriétés de cœur des dislocations. Ce mécanisme avait été suggéré par Saada [Saada 1964] et a été confirmé par d'autres travaux similaires [Zhou *et al.* 1998, Rodney et Philips 1999]. En outre, les simulations atomiques ont permis la description détaillée de la structure des jonctions, comme par exemple dans [Rodney et Philips 1999] dans le cas de matériaux CFC.

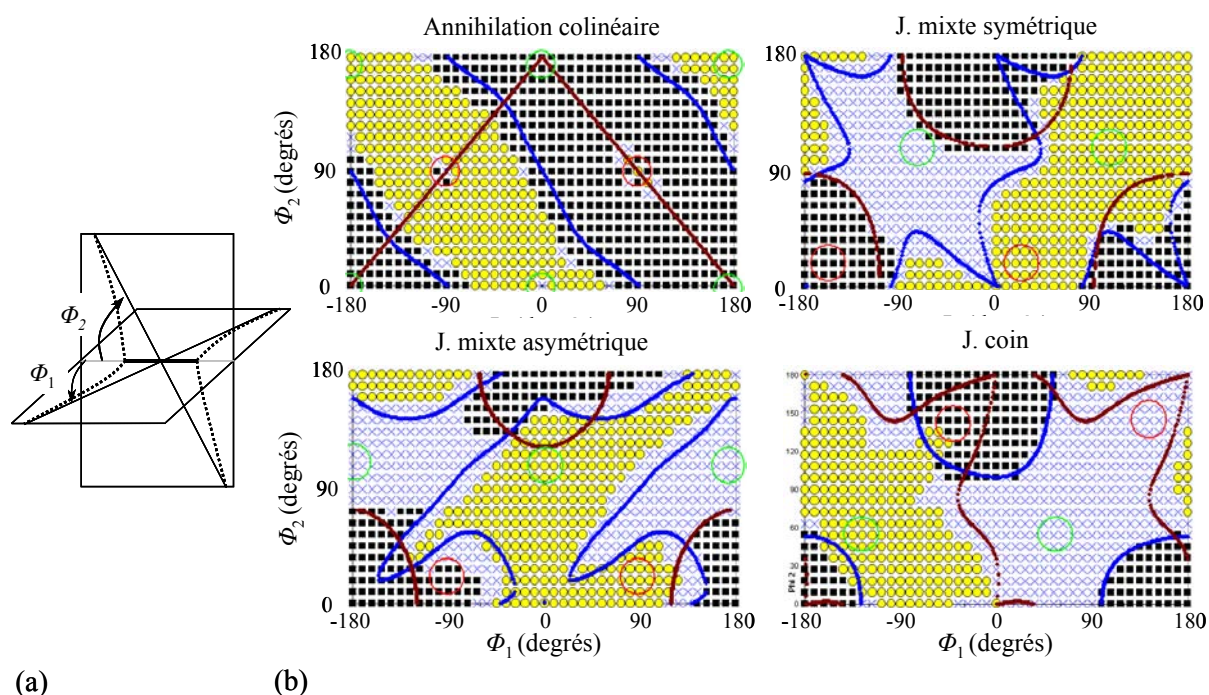


Figure III.2. Cartographies d'interaction obtenues par simulations de DD pour la structure CC [Perrera Da Costa 2004]. Les carrés pleins indiquent que la réaction s'est produite, les ronds l'état répulsif, les dislocations ne sont pas en contact et les croix représentent un état croisé. Les angles sont définis dans la figure (a). Les frontières rouge et bleu sont le résultat de prédictions faites avec un modèle analytique simple.

Parallèlement aux simulations atomiques, les premières simulations à l'échelle mésoscopique se sont développées et ont montré l'importance de l'orientation relative des dislocations sur la formation des réactions. Wickham *et al.* [Wickham *et al.* 1999] ont étudié en détail l'intersection de deux dislocations qui se croisent. Dans un premier temps, aucun chargement n'est appliqué. L'orientation des dislocations par rapport à la direction d'intersection (celle de la réaction) est variée (*cf.* figure III.2.a). Ces simulations mettent en avant deux points intéressants : (i) tout d'abord la réaction est conditionnée par les orientations relatives des deux dislocations mises en jeu. Wickham *et al.* définissent alors une cartographie des interactions. Autrement dit, la faisabilité de la réaction dépend des angles initiaux des deux dislocations. (ii) L'influence des contraintes à plus longues distances se manifeste au travers de l'existence d'un état attractif spécifique dit « croisé ». Etat pour lequel la jonction existe mais n'est pas zippée. Ce mécanisme avait été partiellement prédit par Schoeck et Frydman [Schoeck et Frydman 1972]. Shenoy *et al.* [Shenoy *et al.* 2000] ont, quant à eux, étudié la force des jonctions de Lomer-Cottrell dans l'aluminium et l'argent. L'originalité de leur travail tient, d'une part, de l'utilisation de la théorie élastique anisotrope et, d'autre part, de la prise en compte de la dissociation des dislocations en partielles. Leurs résultats mettent en avant

l'influence de l'application d'un chargement sur la stabilité des jonctions. Leur longueur est, en effet, affectée par la courbure plus ou moins forte des bras de jonction. Ces auteurs définissent une surface de charge en faisant varier les contraintes sur chacun des binômes de la jonction. Il est intéressant de noter que Dupuy et Fivel [Dupuy et Fivel 2002] obtiennent des résultats identiques, à partir de calculs analytiques basés sur une élasticité isotrope et une tension de ligne dépendante de l'orientation de ligne.

La démarche proposée par Wickham *et al.* [Wickham *et al.* 1999] fut reprise par Madec et collaborateurs [Madec 2001, Madec *et al.* 2002], qui ont étendu les cartographies à toutes les réactions de la structure CFC. Forts de ce résultat, Madec *et al.* [Kubin *et al.* 2003, Madec et Kubin 2004] ont réalisé par la suite quelques cartographies pour les interactions des systèmes  $\{110\}$  et  $\{112\}$  de la structure CC. De plus, Madec [Madec 2001] montre l'influence d'un paramètre supplémentaire : la longueur des dislocations qui affecte la force des jonctions. Les bras les plus courts sont plus difficiles à courber. Plus récemment encore, Perrera Da Costa [Perrera da Costa 2004] a défini les cartographies des quatre interactions entre systèmes  $\{110\}$ . Elles sont données en figure III.2.b. Dans le cas des jonctions, les réactions sont regroupées sur des domaines angulaires semblables à des lobes, correspondant au cas où les deux binômes ont des orientations très proches de la direction de la jonction. Tandis que l'annihilation se produit sur un domaine bien plus étendu qui correspond à tout le domaine sur lequel les interactions sont attractives. Ces cartographies ne permettent pas d'établir un lien direct avec les coefficients, mais permettent d'esquisser une comparaison entre les interactions. Le domaine angulaire pour lequel se produit l'annihilation (environ la moitié du domaine complet) est très largement supérieur au domaine des jonctions. Parmi ces dernières, les lobes des jonctions mixtes symétriques sont un peu plus étendus que ceux des autres jonctions.

### III.1.3. Autres approches visant à définir les coefficients d'interaction

Il existe dans la littérature quelques rares études portant sur le durcissement associé à une distribution d'obstacles de la forêt et, non plus, une réaction individuelle. Toutefois, le traitement des obstacles de la forêt fait apparaître de nouvelles simplifications. Les arbres de la forêt sont notamment réduits à des obstacles ponctuels et leur résistance est traitée de manière phénoménologique, via un critère angulaire. Ce dernier mesure, en quelque sorte, la force de la réaction. Le choix concernant la valeur de l'angle critique reste discutable. Olivares et Sevillano [Olivares et Sevillano 1987] reprennent la démarche proposée par Foreman et Makin [Foreman et Makin 1964] pour étudier le durcissement induit par une distribution d'obstacles ponctuels. Les dislocations se courbent en arcs de cercle sous le chargement appliqué. Elles se libèrent d'un obstacle dès lors qu'elles forment, autour de lui, un angle inférieur à l'angle critique. Plus récemment, Politano et Salazar [Politano et Salazar 2000] ont, quant à eux, réalisé des

simulations de DD de l'interaction entre une configuration de dislocations et une forêt modélisée par des obstacles ponctuels. Mais, à nouveau, la stabilité des jonctions est assurée au moyen d'un angle critique et les tensions de lignes utilisées sont fixes. Des ingrédients importants manquent à ces approches, comme la dépendance en orientation de l'énergie des dislocations, ou les interactions à plus longues distances avec le reste de la microstructure de dislocations.

Les études expérimentales portant sur des monocristaux n'apportent pas beaucoup plus d'informations. Les expériences de l'érouissage latent permettent en théorie d'atteindre l'interaction entre deux systèmes choisis au préalable. Ces expériences consistent à densifier un système au cours d'un premier chargement. Ce premier système sera ensuite inactif lors du second chargement, qui active un système différent [Takeuchi et Mano 1972, Franciosi 1983]. Dans le cas des matériaux CFC, ce type de démarche a permis de définir une hiérarchie qualitative entre les jonctions [Franciosi 1984]. Elle a été confirmée ensuite par la DD [Fivel 1994, Madec 2001]. Concernant le fer, seul Franciosi [Franciosi 1983] a estimé quelques coefficients d'interaction. Mais beaucoup n'ont pas été étudiés, notamment entre des systèmes  $\{110\}$ , et cette démarche demeure complexe à mettre en oeuvre. La densité de dislocations est, en effet, la grandeur clef pour le calcul des coefficients, mais sa détermination est difficile à définir avec une précision suffisante.

On retiendra que malgré de nombreux efforts, les expériences et les travaux analytiques ont seulement permis d'estimer certains coefficients de la structure CFC. Mais sans une connaissance plus précise des coefficients dédiés à chaque interaction de la structure CC, aucun modèle prédictif fiable ne peut être espéré. En outre, l'influence de multiples paramètres physiques a clairement été mise en avant. On peut citer notamment la nature des systèmes de glissement qui définit les propriétés de la réaction, l'orientation relative des dislocations qui se croisent, leur longueur ou encore l'application d'un chargement qui affecte la stabilité des jonctions. Il ne faut pas oublier de plus que les jonctions sont des obstacles étendus et non pas ponctuels. A cela s'ajoutent les interactions avec le reste de la microstructure de dislocations ou encore l'existence de comportements collectifs des dislocations. Il apparaît évident que seules les simulations à l'échelle mésoscopique, et en particulier la DD, peuvent rendre compte de l'ensemble de ces effets, et à la fois assurer une certaine représentativité statistique. C'est ce que nous allons voir dans ce qui suit.

### **III.1.4. Détermination des coefficients d'interaction par simulations de DD**

#### **Présentation des simulations de l'érouissage latent**

Il faudra attendre les travaux réalisés par Fivel *et al.* [Fivel 1994, Fivel *et al.* 1998] et Madec

*et al.* [Madec 2001, Madec *et al.* 2003] pour déterminer les coefficients d'interaction de la structure CFC à l'aide de simulations de DD. La stabilité des jonctions est traitée de manière élastique sans aucun critère angulaire. Madec discute plusieurs approches qu'il avait envisagées dans [Madec 2001], comme par exemple la simulation d'un changement de trajet ou du glissement double. Il retiendra l'approche par simulations modèles de l'écroissage latent, proposées par Fivel [Fivel 1994], qui reprennent partiellement ce qui est fait au cours des expériences du même nom. Un unique système de glissement actif interagit avec des systèmes de la forêt qui ne peuvent pas se multiplier. Le choix des systèmes de la forêt est fait de manière à ce que leur interaction avec le système actif conduise à un même type de réaction. Ce dernier point est d'ailleurs l'intérêt majeur de ces simulations qui mesurent la contribution d'une unique interaction. Il ne s'agit pas, à proprement parler, d'une expérience complète de l'écroissage latent, puisque la microstructure initiale des dislocations n'est pas obtenue à partir d'une prédéformation. Mais pour simplifier, nous les nommerons simplement simulations de l'écroissage latent. Madec *et al.* [Madec 2001, Madec *et al.* 2003] définissent ainsi les coefficients d'interaction (du type du coefficient  $a$  intervenant dans la relation de Franciosi) pour les quatre principales réactions de la structure CFC. Ils montrent pour la première fois que l'annihilation colinéaire est une réaction très forte. La force de la réaction colinéaire permettra d'expliquer certaines observations faites sur les monocristaux. Nous reviendrons sur ces points par la suite. Les simulations de l'écroissage latent ont depuis lors été appliquées à d'autres structures [Madec et Kubin 2004b, Monnet *et al.* 2004, Devincre *et al.* 2006].

A l'origine, le modèle de la forêt néglige le terme logarithmique qui intervient dans la tension de ligne et fait apparaître notamment un rayon de coupure supérieur  $R$ . Ce dernier est proportionnel à la distance entre arbres de la forêt  $\rho_f^{-1/2}$ . C'est pourquoi les coefficients d'interaction des équations III.1 et III.2 dépendent logarithmiquement de la densité de dislocations de la forêt. Ceci a depuis longtemps été suggéré notamment par Schoeck et Frydman [Schoeck et Frydman 1972], puis démontré par les simulations de DD réalisées par Madec *et al.* [Madec *et al.* 2002]. Afin de prendre en compte cette dépendance, Devincre *et al.* [Devincre *et al.* 2006] ont proposé d'exprimer le rayon de coupure sous la forme  $R = \langle l_f \rangle \approx 1/\sqrt{\beta\rho_f}$ . Avec cette définition, le coefficient d'interaction entre systèmes de glissement est dorénavant noté  $\beta$  pour le distinguer des coefficients  $a$  intervenant dans la relation de Franciosi (*cf.* équation III. 2). Ce formalisme reprend l'idée que la distance entre les réactions avec la forêt  $\langle l_f \rangle$  peut être bien supérieure à la grandeur  $\rho_f^{-1/2}$  issue de l'hypothèse d'une densité homogène. Qui plus est,  $\langle l_f \rangle$  dépend de la nature de la réaction mise en jeu. Devincre *et al.* introduisent également la notion de densité de référence  $\rho_{ref}$  qui est celle à



laquelle le coefficient  $\beta$  est déterminé. Avec cette définition, ils proposent d'écrire la cission critique dès lors que la densité  $\rho_f$  diffère de celle de référence, de la manière suivante (ici dans le cas d'une unique interaction) :

$$\tau_c = \mu b \frac{\ln\left(\frac{1}{b\sqrt{\beta\rho_f}}\right)}{\ln\left(\frac{1}{b\sqrt{\beta\rho_{ref}}}\right)} \sqrt{\beta\rho_f} \quad \text{Équation III.4}$$

Les coefficients d'interaction  $\beta$  sont indépendants de la densité de la forêt. L'égalité entre les équations III.3 et III.4 conduit à la relation suivante entre les coefficients  $\beta$  et les coefficients  $a$  qui interviennent dans la relation de Franciosi :

$$a = \left[ \frac{\ln\left(\frac{1}{b\sqrt{\beta\rho_f}}\right)}{\ln\left(\frac{1}{b\sqrt{\beta\rho_{ref}}}\right)} \right]^2 \beta \quad \text{Équation III.5}$$

Il est important de noter que cette correction logarithmique peut s'avérer rapidement significative. Considérons le cas d'un coefficient d'interaction  $\beta$  faible, valant par exemple 0,05 et défini pour une densité  $\rho_{ref}$  de  $10^{12} \text{ m}^{-2}$ . La prédiction du modèle de Franciosi surestime la contrainte d'écoulement de 22 % pour une densité de la forêt de  $\rho_f$  de  $10^{13} \text{ m}^{-2}$ . Cette différence passe à près de 40 % si  $\rho_f$  atteint  $10^{14} \text{ m}^{-2}$ . Qui plus est, l'erreur commise sera d'autant plus importante pour les interactions les plus fortes.

Les résultats obtenus par Devincere *et al.* [Devincere *et al.* 2006] sont présentés dans le tableau III.3 en vue de la comparaison ultérieure avec ceux de la structure CC.

Tableau III.3. Valeurs des principaux coefficients d'interaction obtenus pour la structure CFC par Devincere *et al.* [Devincere *et al.* 2006], pour une densité de référence de  $10^{12} \text{ m}^{-2}$ .

Réaction	Hirth	Glissile	Lomer-Cottrell	Colinéaire
Coefficient $\beta$	$0,0454 \pm 0,003$	$0,137 \pm 0,014$	$0,122 \pm 0,012$	$0,625 \pm 0,044$

### L'apport des lois de plasticité cristalline

L'utilisation de lois de plasticité cristalline dans des approches continues est désormais assez courante. Les problèmes métallurgiques abordés vont de la compréhension de la dépendance en orientation du comportement des monocristaux sollicités en traction [Tabourot *et al.* 1997, Hoc *et al.* 2001, Stainier *et al.* 2002], à l'étude de chargements plus complexes [Busso et Cailletaud 2004, Viatkina *et al.* 2005, Bittencourt *et al.* 2002], ou encore à la prédiction des phénomènes de localisation plastique [Viatkina *et al.* 2005, Arsenlis *et al.* 2004]. Toutefois, les paramètres qui sont mis en jeu et notamment les coefficients d'interactions, sont rarement basés sur des simulations de DD et sont bien souvent utilisés comme des paramètres ajustables [Hoc *et al.* 2003, Barlat *et al.* 2002].

Dans ce contexte, il faut souligner l'une des premières études réalisée par Hoc *et al.* [Hoc *et*

*al.* 2004] qui utilise des résultats issus de la DD. Ils montrent l'importance de l'interaction colinéaire dans la déformation en glissement simple des monocristaux de CFC. Le glissement conjugué est théoriquement activé dès lors que la cission critique sur le second système égalise celle sur le primaire. Or les modèles physiques existants de l'écroutissage en glissement simple (stade I) ne permettent pas de vérifier cette dernière condition pour des déformations réalistes. En effet, d'un côté, la cission critique sur le système secondaire augmente à cause de l'interaction avec le système primaire. D'un autre côté, la cission sur le système primaire est liée principalement à l'auto-interaction qui est faible, le système secondaire n'est pas encore actif. Le décalage qu'il existe entre le début du glissement double expérimental et théorique, indique qu'il existe une contribution supplémentaire qui s'exerce sur la cission du système primaire. Hoc et ses collaborateurs démontrent [Hoc *et al.* 2004] qu'il s'agit de la présence de super-crans colinéaires formés par le glissement dévié d'origine mécanique. Bien que la densité des super-crans reste faible, l'interaction colinéaire est telle qu'elle augmente de manière significative la cission critique sur le système primaire. Ces auteurs prédisent ainsi correctement la longueur du stade I et retrouvent également la dépendance en orientation des courbes de déformation des CFC.

Les lois cristallines ont permis d'expliquer un second phénomène mal compris concernant toujours les matériaux de structure CFC, qui est aisément transposable aux matériaux CC à haute température. Pour les directions de hautes symétries, le nombre de systèmes de glissement correspond souvent à la moitié du nombre de systèmes théoriquement activables (présentant le même facteur de Schmidt) [Honeycombe 1968, Franciosi 1984]. Ces derniers sont d'ailleurs colinéaires deux à deux. Devincere *et al.* [Devincere *et al.* 2005] retrouvent la sélection des systèmes de glissement en rendant compte de la très forte interaction avec les systèmes colinéaires. Les systèmes qui restent actifs ne sont en effet pas colinéaires entre eux. La nature même de cette interaction, qui conduit à l'annihilation des dislocations sécantes, introduit une compétition entre les deux systèmes colinéaires. L'activité d'un système réduit la densité des systèmes colinéaires, ce qui n'est pas le cas des jonctions. C'est d'ailleurs pour cette raison que la très forte contribution colinéaire n'est généralement pas observée expérimentalement.

### **Détermination des coefficients d'interaction de la structure CC**

Concernant la structure CC, il n'existe dans la littérature qu'une seule détermination des coefficients d'interaction par la DD. Ce travail a été réalisé par Madec et Kubin [Madec et Kubin 2004b] et reprend les simulations de l'écroutissage latent utilisées pour les interactions du CFC. La densité des dislocations de la forêt  $\rho_f$  est de  $10^{12} \text{ m}^{-2}$ . La configuration initiale de la forêt est obtenue à partir de dislocations ancrées à leurs extrémités d'une longueur de  $1 \mu\text{m}$ . La densité primaire est de  $10^{11} \text{ m}^{-2}$ . Deux longues dislocations primaires, de  $50 \mu\text{m}$ , sont introduites

[Madec 2007]. Elles ont un caractère initial identique, mais leurs vecteurs lignes sont opposés. Les résultats obtenus de cette manière par Madec et Kubin [Madec et Kubin 2004b] sont donnés dans le tableau III.4. Ils seront discutés un peu plus loin.

Tableau III.4. Valeurs des coefficients<sup>1</sup> données par Madec et Kubin pour les différentes interactions entre les systèmes de plans {110} de la structure CC [Madec et Kubin 2004b].

Réaction	J. mixte symétrique	J. mixte asymétrique	J. coin	Colinéaire
Coefficient $a$ (ou $\beta$ )	0,06	0,04	0,045	0,55

### III.2. Etude du mécanisme de la forêt par simulations de DD

Comme nous venons de le voir, les lois de comportement cristallines ont permis de comprendre ou de reproduire certaines caractéristiques importantes du comportement plastique des CFC. Ce succès récent résulte en partie des simulations de DD, grâce auxquelles certains paramètres clefs ont été établis avec précision. D'autre part, les observations expérimentales reportées au cours du premier chapitre, témoignent de similitudes de comportement plastique entre les matériaux CFC et CC dans le régime athermique. Comme nous souhaitons disposer d'un modèle prédictif performant, nous allons réutiliser une partie des développements réalisés pour les CFC. Naturellement, la première étape consiste à définir les coefficients d'interactions. Les résultats obtenus par Madec sont difficilement utilisables du fait des spécificités (friction d'alliage élevée et une forte densité de dislocations) du matériau de notre étude.

En suivant les conclusions du chapitre II, la présence des éléments en solution solide est prise en compte au moyen d'une contrainte de friction d'alliage d'une valeur de 30 MPa. Les observations microscopiques (*cf.* chapitre I) des aciers de cuve [Karlik 2002] indiquent que la densité de dislocations est élevée dans la ferrite, généralement de l'ordre de  $10^{14} \text{ m}^{-2}$ . On peut supposer que la répartition de cette densité est homogène sur les douze systèmes de plans {110}, ce qui est équivalent à considérer une densité d'environ  $10^{13} \text{ m}^{-2}$  sur chacun de ces systèmes. Cette dernière valeur sera prise comme la densité initiale sur chaque système, primaire et de la forêt. Le système primaire sera fixe tout au long de cette partie, il s'agit du premier système du tableau III.1, soit  $\frac{1}{2} [1\bar{1}1]$  (110). D'après le tableau III.2, si le système primaire est fixé, alors le nombre de systèmes de la forêt qui conduisent à la même réaction est toujours de deux. La seule exception concerne la jonction mixte asymétrique qui compte quatre systèmes possibles. Nous faisons le choix de construire la configuration de la forêt à partir des

<sup>1</sup> Lors des simulations de l'érouissage latent, une seule densité de dislocations de la forêt est mise en jeu. Les coefficients d'interaction  $a$  et  $\beta$  sont donc équivalents.

deux (respectivement quatre) systèmes. La densité totale de la forêt  $\rho_f$  est ainsi de  $2 \cdot 10^{13} \text{ m}^{-2}$ . Ce qui correspond à une distance géométrique entre arbres de la forêt  $\rho_f^{-1/2}$  de  $0,2 \text{ }\mu\text{m}$ . Les diverses dimensions qui interviennent dans les simulations sont adaptées à cette grandeur caractéristique. En reprenant les conclusions du Chapitre II qui concernent le fonctionnement d'une source de Frank-Read, la longueur de discrétisation est prise égale à  $\rho_f^{-1/2} / 5 \approx 0,05 \text{ }\mu\text{m}$ . Les simulations portent sur un volume de  $2 \text{ }\mu\text{m}$  de côté ( $10 \rho_f^{-1/2}$ ).

Bien que le terme de simulations de l'érouissage latent corresponde à un type de simulations établi, elles autorisent quelques degrés de liberté. En particulier, le mode de sollicitation et la configuration initiale des dislocations doivent être maîtrisés. C'est pourquoi une étude de sensibilité a été réalisée concernant trois points particulièrement importants : (i) la vitesse de déformation imposée, (ii) la longueur des sources du système primaire et (iii) la longueur des arbres des systèmes de la forêt. En outre, l'influence d'autres paramètres a été recherchée mais ne sera pas développée ici, par souci de concision. Il a, notamment, été vérifié que la densité du système primaire n'affecte pas les résultats. L'utilisation d'une densité plus basse allonge simplement le régime transitoire. Et ensuite, à densité totale fixe, le nombre de systèmes servant à la construction de la configuration de la forêt n'affecte pas non plus la contrainte du plateau.

### III.2.1. Etude de sensibilité aux paramètres de simulations

Afin de limiter le nombre de simulations, l'étude de sensibilité porte sur une unique interaction relative à la formation de jonctions mixtes symétriques. On supposera que les conclusions relatives à cette partie sont valables pour les autres interactions.

#### La vitesse de déformation

Les travaux expérimentaux réalisés sur le fer [Jaoul et Gonzales 1960, Keh et Nakada 1968] ont montré que, dans le régime athermique, le mécanisme de la forêt est indépendant de la vitesse de déformation. C'est pourquoi les coefficients d'interactions sont également supposés indépendants de la vitesse de déformation. Afin de s'assurer de ce point, des simulations de l'érouissage latent sont réalisées pour différentes vitesses de déformation, couvrant une plage de  $500$  à  $8000 \text{ s}^{-1}$ .

Le domaine de vitesses de déformation exploré peut paraître considérable en regard des vitesses utilisées expérimentalement. Néanmoins, cette différence se justifie par deux points. Tout d'abord, la vitesse de déformation  $\dot{\gamma}$  est liée, par la célèbre loi d'Orowan  $\dot{\gamma} = \rho_m b \bar{v}$ , à la densité de dislocations mobiles  $\rho_m$ , qui dans nos simulations est assez grande. La densité  $\rho_m$  est généralement de l'ordre de  $\rho_1/10$  [Kocks et Mecking 2003] et vaut dans ce cas  $10^{12} \text{ m}^{-2}$ . Ainsi,

partant de la loi d'Orowan, on en déduit que la vitesse moyenne des dislocations  $\bar{v}$  doit être de l'ordre de 8 m/s pour satisfaire une consigne de  $2000 \text{ s}^{-1}$  par exemple. Cette valeur est tout à fait acceptable et comparable aux vitesses de dislocations mesurées expérimentalement [Urabe et Weerman 1975]. D'un autre côté, les fortes densités de dislocations mises en jeu ici, nous autorisent à travailler avec des volumes de l'ordre du micromètre. Ainsi chaque déplacement élémentaire de segments de dislocation conduit à une déformation importante, dès lors qu'il est rapporté à ces petits volumes.

Quelle que soit la vitesse imposée, les courbes de déformation présentent un pic de multiplication (*cf.* les deux exemples en figure III.4.a). Ce pic est d'ailleurs plus marqué et plus large pour les vitesses de déformation plus élevées. Toutefois, après 0,6 % de cisaillement, les courbes convergent vers le même plateau. En effet, la densité d'obstacles est fixe (la forêt ne pouvant pas se multiplier) et les interactions dipolaires, bien que non négligeables comme nous le verrons par la suite, n'induisent pas un écrouissage important. Il est possible de calculer les coefficients à l'aide de l'équation III.4<sup>2</sup>, de la contrainte dans le plateau et des densités. La procédure complète du calcul des coefficients sera détaillée plus loin. La figure III.4.b permet de vérifier que la vitesse de déformation n'affecte pas la valeur du coefficient d'interaction.

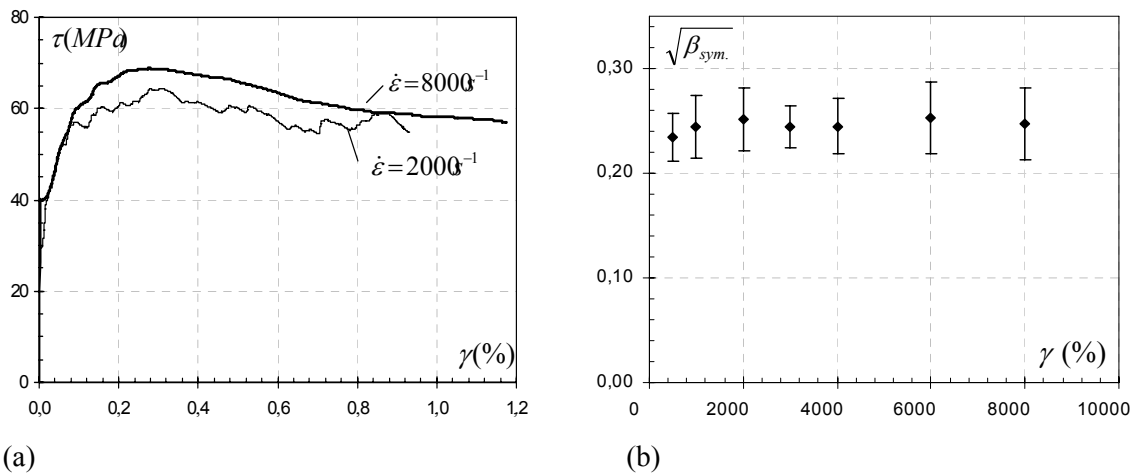


Figure III.3. (a) Effet de la vitesse de déformation sur les courbes de déformation obtenues au cours de simulations de l'écrouissage latent. (b) Valeurs du coefficient d'interaction  $\beta_{sym}$  de la jonction mixte symétrique en fonction de la vitesse de déformation. Les coefficients sont définis en considérant la contrainte d'écoulement loin du pic de multiplication.

Ces simulations donnent l'occasion de fixer la vitesse de déformation pour les simulations à

<sup>2</sup> L'équation III.4 est équivalente à la relation de Franciosi puisque  $\rho_f = \rho_{ref}$  dans le cas des simulations de l'écrouissage latent. Mais cette relation est préférée pour rappeler la nécessité du terme logarithmique.

venir. Ce choix est motivé par deux points : d'une part il est préférable de s'affranchir de la présence d'un pic de multiplication qui pourrait induire en erreur la mesure des coefficients. D'autre part, des vitesses de déformation élevées permettent un gain de temps non négligeable (pour un pas de temps fixé). Une vitesse de  $2000 \text{ s}^{-1}$  apparaît comme un bon compromis et sera la consigne de vitesse utilisée dans les simulations futures.

### La longueur initiale des sources primaires

Afin de mettre en évidence un éventuel effet de la longueur initiale  $L_1$  des sources du système primaire, deux cas limites sont étudiés. La configuration du système primaire est construite soit à partir de (i) sources courtes d'une longueur de  $0,4 \text{ }\mu\text{m}$  ( $2 \rho_f^{-1/2}$ ) (ii) soit de sources plus longues de  $2 \text{ }\mu\text{m}$  ( $10 \rho_f^{-1/2}$ ).

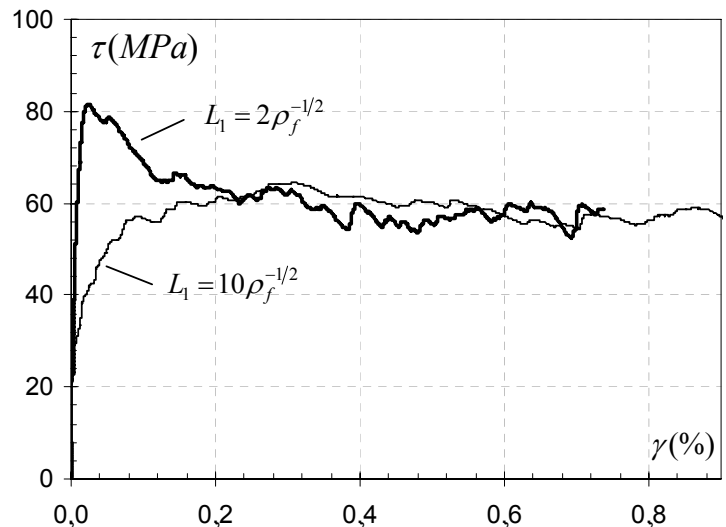


Figure III.4. Effet de la longueur initiale des sources du système primaire  $L_1$  sur la contrainte d'écoulement au cours d'une simulation de l'écrouissage latent, avec  $2 \rho_f^{-1/2} = 0,4 \text{ }\mu\text{m}$  et  $10 \rho_f^{-1/2} = 2\mu\text{m}$ .

La figure III.5 montre l'influence de  $L_1$  sur les courbes de déformation des simulations de l'écrouissage latent. L'utilisation de sources courtes induit un crochet (yield point) important sur la courbe correspondante, tandis qu'il n'apparaît pas dans le second cas. Soustraction faite de la contrainte de friction d'alliage, la contrainte dans le crochet est proche de 52 MPa. Les deux courbes sont ensuite confondues après  $\gamma = 0,4$  %. L'existence de ce crochet est liée à la contrainte nécessaire pour l'activation des sources primaires. Il est possible de calculer cette dernière à partir de la relation de Foreman [Foreman 1967] (cf. équation II.6). Elle est de 56

MPa dans le cas des petites sources, ce qui est comparable avec la valeur du crochet. Dans le cas des longues sources, la contrainte d'activation est bien plus basse, de l'ordre de 12 MPa, ce qui est nettement inférieur à la valeur dans le plateau. Pour les mêmes raisons que celles évoquées plus tôt, nous allons éviter la présence d'un décrochement sur les courbes de déformation. C'est pourquoi, la configuration du système primaire sera formée de longues sources de  $2 \mu\text{m}$  ( $10 \rho_f^{-1/2}$ ).

### Influence de la longueur des arbres de la forêt

A la différence des deux précédents paramètres, qui nécessitent un peu de soin quant à la définition de la contrainte dans le plateau, la longueur des arbres de la forêt affecte directement la valeur des coefficients d'interaction. Devincré *et al.* [Devincré *et al.* 2006] ont récemment discuté de ce point, indiquant que la longueur des arbres de la forêt ne modifie pas le nombre de jonctions, mais en affecte la longueur. Afin de quantifier cet effet, la longueur des arbres de la forêt est variée sur un domaine de 2 à  $24 \rho_f^{-1/2}$ .

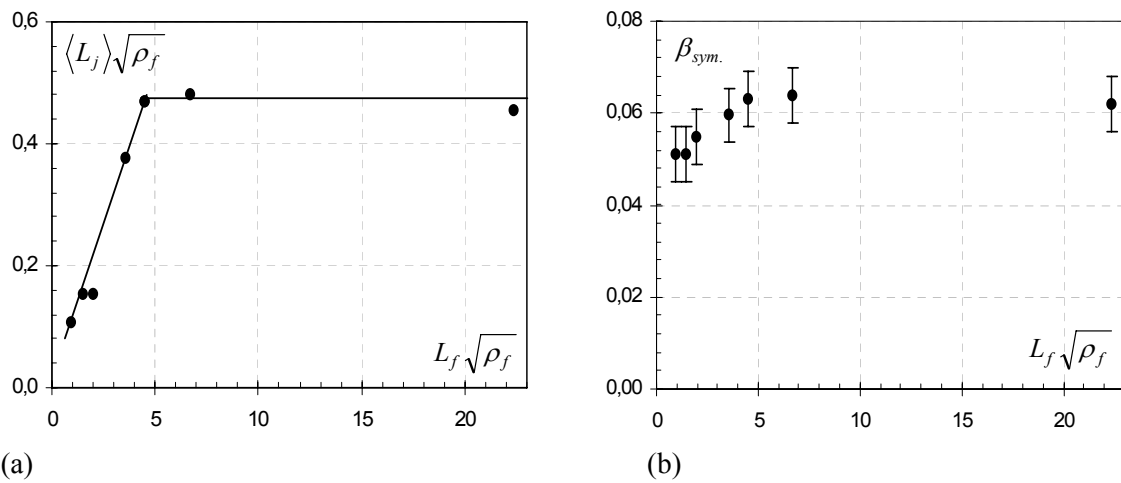


Figure III.5. Effet de la taille des arbres de la forêt  $L_f$  sur (a) la longueur moyenne des jonctions  $\langle L_j \rangle$  au cours des simulations de l'écroutissage latent et (b) sur le coefficient d'interaction.

La figure III.7.a reporte l'effet de la longueur des arbres de la forêt sur la longueur moyenne des jonctions. Deux domaines se distinguent clairement : un domaine de longueurs de forêt supérieures à  $1 \mu\text{m}$  ( $4 \rho_f^{-1/2}$ ), pour lequel la longueur moyenne des jonctions change peu et est égale à  $0,45 \rho_f^{-1/2}$  ; et un domaine de longueurs de forêt inférieure à  $1 \mu\text{m}$  ( $4 \rho_f^{-1/2}$ ), pour lequel, à l'inverse, la longueur des jonctions formées diminue linéairement avec la taille des arbres de

la forêt. Cet effet est lié à la taille des bras forêt de la jonction. Plus ils sont courts, plus ils sont rigides et empêchent l'allongement des jonctions. Ces dernières étant plus courtes sont également moins stables, car plus aisément défaites. C'est pourquoi on retrouve également cet aspect bimodal dans la figure III.7.b qui montre la dépendance du coefficient d'interaction  $\beta$  avec la taille des arbres de la forêt. La différence entre les situations extrêmes atteint 25 %.

Cette influence est un artefact associé à la présence de points d'ancrage aux extrémités des arbres de la forêt, qui n'existent pas dans un matériau réel. C'est pourquoi les coefficients ne doivent pas dépendre de la taille des arbres de la forêt. Les configurations de la forêt seront construites à partir de longs arbres de la forêt d'une taille de  $1 \mu\text{m}$  ( $4\rho_f^{-1/2}$ ).

### III.2.2. Détermination des coefficients d'interaction

Le Tableau III.5 résume les résultats que nous venons de présenter. Ces paramètres seront utilisés tout au long de ce qui suit.

Tableau III.5. Valeurs de la vitesse de déformation et des différents paramètres des configurations de dislocations retenus à la suite de l'étude de sensibilité.

$\rho_1 (\text{m}^{-2})$	$L_1 (\mu\text{m})$	$\rho_f (\text{m}^{-2})$	$L_f (\mu\text{m})$	$\dot{\epsilon} (\text{s}^{-1})$
$10^{13}$	2,2	$2 \cdot 10^{13}$	1	2000

### Mesures des interactions dipolaires et procédure de calcul des coefficients

Les simulations de l'écroutissage latent mettent en jeu un second durcissement qui se superpose à l'interaction avec la forêt. Il s'agit de l'auto-interaction du système primaire (ou interaction dipolaire). Lors des premières études, son effet a été volontairement éliminé des calculs des coefficients [Madec 2001, Madec *et al.* 2003]. Mais il n'est pas certain que cette simplification se justifie dans tous les cas. Le rôle de l'auto-interaction est en fait complexe et difficile à prédire. L'empilement des dislocations primaires peut favoriser le passage d'obstacles comme l'illustre la figure III.3.a. Ou, à l'inverse, les dislocations primaires sont arrêtées sous forme de dipôles plus ou moins forts suivant la distance qui les sépare. La contrainte doit alors être accrue pour casser un dipôle ou remobiliser d'autres dislocations primaires.

Devincre *et al.* [Devincre *et al.* 2006] ont pris le parti de s'affranchir de ce problème à sa source. C'est-à-dire que les interactions dipolaires entre les dislocations primaires glissant sur des plans différents sont supprimées au cours de leurs simulations. Seules sont conservées les interactions sur des sections appartenant à une même dislocation.

Afin de lever toute ambiguïté au sujet de l'effet des interactions dipolaires, dans le cadre de notre étude, nous allons dans un premier temps mesurer le durcissement qui leur est associé.



Pour cela, une simulation modèle de l'interaction d'un unique système actif est effectuée. Ce système est aussi le seul système introduit dans le volume de simulation. Par commodité, cette simulation sera nommée simulation de l'interaction dipolaire.

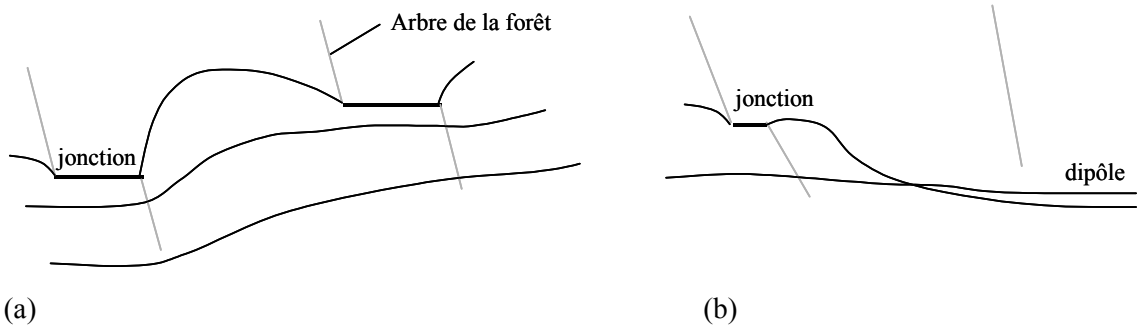


Figure III.6. Schémas illustrant les deux effets associés aux interactions dipolaires : (a) l'accumulation de dislocations primaires répulsives favorise le passage des jonctions (b) un dipôle attractif bloque l'avancée de la dislocation primaire vers l'obstacle suivant de la forêt.

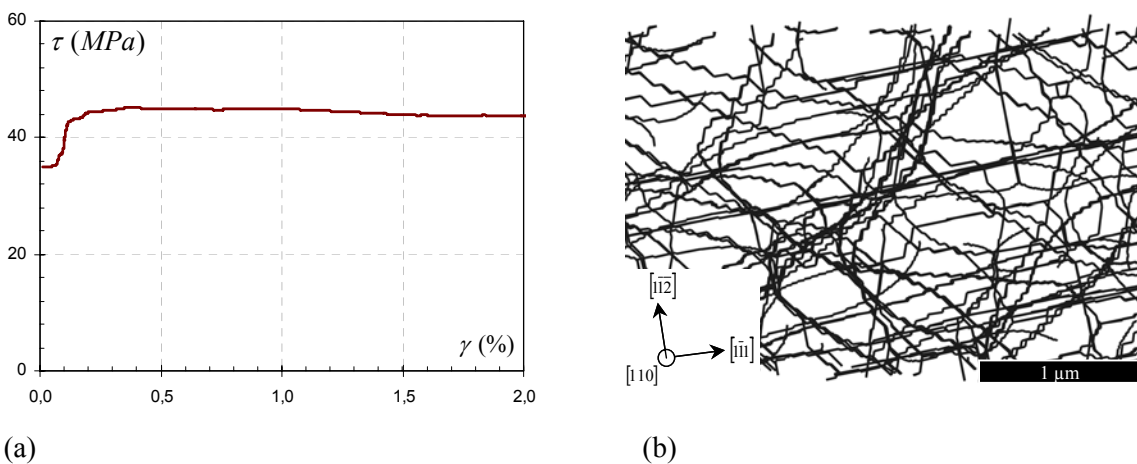


Figure III.7. (a) Courbe de déformation au cours de la simulation de l'interaction dipolaire. (b) Lame d'une épaisseur de 0,4  $\mu\text{m}$  obtenue en fin de simulation après 2 % de cisaillement. Le plan d'observation coïncide avec le plan de glissement du système primaire.

La contrainte d'écoulement obtenue est reportée en figure III.7.a. Elle présente une allure surprenante : elle s'apparente à un plateau de 44 MPa à partir de  $\gamma = 0,2$  %. Ce point est en contradiction avec l'augmentation de densité importante qui se produit. En effet, la densité passe de 2 à 8  $10^{13} \text{ m}^{-2}$ , ce qui devrait induire un écrouissage visible. Au départ, la déformation est probablement contrôlée par la contrainte nécessaire à l'activation des sources, qui est de l'ordre de 12 MPa (*cf.* partie III.2.1). Cette simulation modèle démontre simplement que les interactions dipolaires donnent lieu à une contrainte de l'ordre de 15 MPa, qui est non

négligeable en regard des densités mises en jeu ici. Ceci est du reste confirmé par la microstructure des dislocations présentée en figure III.7.b. Elle révèle l'existence de dipôles et de multipôles, qui tendent à canaliser la déformation plastique.

Il est donc crucial de supprimer les interactions dipolaires lors de la mesure des coefficients d'interactions. Toutefois, la méthode que proposent Devincere *et al.* [Devincere *et al.* 2006] est un peu contraignante. Elle impose de désactiver certaines méthodes d'optimisation numérique, ce qui allonge considérablement la durée des simulations. Une méthode alternative est proposée dans ce qui suit. L'idée de départ consiste à supposer que les interactions dipolaires et les réactions avec les systèmes de la forêt sont bien discernables. Ainsi, la contrainte d'écoulement fait désormais intervenir un coefficient associé aux interactions dipolaires  $\beta_{dip}$  :

$$\tau_c = \mu b \sqrt{\beta_{dip} \rho_1 + \beta_f \rho_f} + \tau_F \quad \text{Équation III.6}$$

Avec  $\beta_f$  le coefficient qui correspond à l'interaction entre le système primaire et la forêt  $f$ . La correction logarithmique  $\chi$  est ici enlevée (*cf.* équation III.4), à la fois par souci de clarté et parce qu'elle n'est, à priori, pas nécessaire dans le cas des simulations de l'écrouissage latent. Au final, on calculera le coefficient  $\beta_f$  à l'aide de l'équation III.7 :

$$\beta_f = \frac{[(\tau_c - \tau_F) / \mu b]^2 - \beta_{dip} \rho_1}{\rho_f} \quad \text{Équation III.7}$$

Le coefficient associé aux interactions dipolaires est déterminé à partir de la courbe donnée en figure III.7.a. On déduit le coefficient  $\beta_{dip}$  de l'équation III.4 :

$$\beta_{dip} = \frac{[(\tau_c - \tau_F) / \mu b]^2}{\rho_1} \quad \text{Équation III.8}$$

Les valeurs de la contrainte  $\tau_c$  et de la densité primaire sont prises en fin de courbe de déformation donnée en figure III.7.a, pour éviter les problèmes évoqués plus haut. Rappelons que dans la ferrite,  $\mu$  vaut 83,6 GPa [Ghosh et Olson 2002] et  $b$  vaut 2,48 Å. Le coefficient  $\beta_{dip}$  est ainsi estimé à 0,0068. Cette valeur sera discutée par la suite.

En vue de tester la validité de cette approche, nous avons réalisé deux simulations de l'écrouissage latent : une première dans laquelle les interactions dipolaires sont supprimées selon la méthode proposée par Devincere *et al.* [Devincere *et al.* 2006], et une seconde dans laquelle ces interactions sont conservées. Les deux portent sur la jonction mixte symétrique. Lorsque les interactions dipolaires sont supprimées de la simulation, le coefficient d'interactions  $\beta_{sym}$  mesuré vaut  $0,065 \pm 0,01$ . Tandis qu'en partant de la seconde simulation, le coefficient est estimé à  $0,063 \pm 0,006$  avec l'équation III.7. La différence constatée entre ces deux résultats est inférieure à la précision qu'autorisent nos simulations, ce qui valide la démarche proposée pour supprimer les interactions dipolaires en post-traitement.

### Microstructures et valeurs des coefficients

L'observation des microstructures simulées de dislocations met en évidence certaines différences et permet une comparaison qualitative des différentes interactions. La figure III.8 regroupe quatre lames, issues des simulations pour chaque interaction, obtenues à la contrainte d'écoulement plateau.

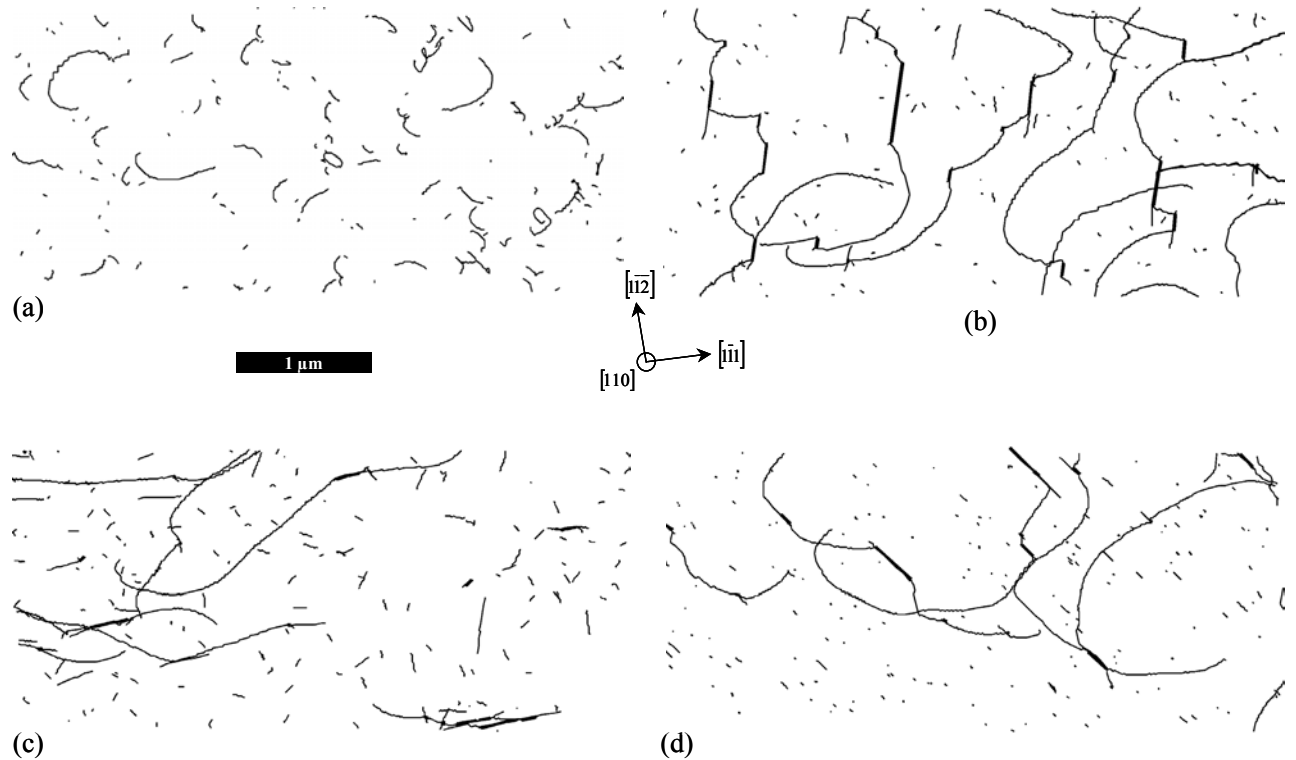


Figure III.8. Microstructures de dislocations au cours des simulations de l'écroutissage latent. Les lames sont obtenues sous chargement dans le plateau, après 0,4 % de cisaillement. Les jonctions sont en traits épais. Les microstructures correspondent respectivement à (a) l'annihilation colinéaire, (b) la jonction mixte symétrique, (c) la jonction mixte asymétrique et (d) la jonction coin.

Tout d'abord, la microstructure associée à l'interaction colinéaire est singulièrement différente des autres. Les dislocations primaires sont très courtes, suite aux annihilations avec les dislocations de la forêt qui les sectionnent. Elles ont une forte courbure qui est liée à la force des réactions, qui ancrent plus ou moins les dislocations. En revanche, les microstructures concernant les jonctions sont plus semblables. Les dislocations primaires y sont bien moins courbées. Mais, une observation plus fine de la microstructure des jonctions mixtes symétriques montre qu'elle diffère des deux autres interactions contrôlées par la formation de jonctions. La courbure des dislocations primaires est plus forte et les jonctions y sont plus nombreuses et plus longues. Les jonctions mixtes asymétriques et coins sont donc moins nombreuses et plus

courtes. C'est pourquoi la répartition des dislocations primaires est moins homogène, puisque ces dernières sont ancrées moins régulièrement. La courbure des dislocations ainsi que le nombre et la longueur des jonctions sont autant d'indications sur la force et la stabilité des jonctions. Au final, il apparaît donc que l'interaction colinéaire est bien plus forte que celles conduisant à la formation des jonctions. Et parmi ces dernières les jonctions mixtes symétriques semblent plus fortes que les deux dernières jonctions.

Les séquences dynamiques font également apparaître quelques différences concernant la propagation des dislocations primaires au travers de la population d'arbres de la forêt. Leur mouvement s'opère plutôt par successions de sauts, dans le cas des jonctions mixtes symétriques. Les dislocations avancent jusqu'à obtenir la courbure nécessaire au dézippage de la jonction. Cette libération entraîne parfois une série de nouvelles destructions de jonctions le long de la même dislocation primaire. Ceci contraste avec le comportement des dislocations en présence des jonctions mixtes asymétriques et coins pour lesquelles le mouvement des dislocations est plus régulier. Le temps d'ancrage par jonction est abaissé car ces jonctions sont en moyenne plus courtes. La courbure nécessaire à leur destruction est aussi plus vite atteinte.

D'une manière plus quantitative, la longueur moyenne des jonctions se stabilise autour de  $0,45 \rho_f^{-1/2}$  pour les jonctions mixtes symétriques dès 0,2 % de cisaillement. Ce qui représente le double de la longueur des deux autres types de jonctions, qui font en moyenne  $0,2 \rho_f^{-1/2}$ . Ensuite pour une même déformation, le nombre de jonctions coins est pratiquement équivalent à celui des jonctions mixtes symétriques. Tandis que le décompte des jonctions mixtes asymétriques est moindre de 30 %.

La comparaison des courbes de déformation présentées en figure III.10 permet de confirmer les observations précédentes. En effet, la contrainte d'écoulement relative à l'interaction colinéaire est nettement supérieure à celles des jonctions. Globalement, les courbes présentent le plateau attendu, bien que celles associées aux jonctions présentent un léger pic de multiplication (cf. III.2.1). Ce point est plus visible encore sur l'évolution des coefficients en fonction de la déformation plastique, calculés à partir de l'équation III.7 (cf. figure III.11). Le coefficient colinéaire est le seul relativement constant tout au long de la simulation dès  $\gamma = 0,2$  %, tandis que ceux relatifs aux jonctions présentent un pic aux alentours de  $\gamma = 0,1-0,3$  %. Néanmoins, ces derniers semblent osciller autour d'une valeur constante après 0,5 % de cisaillement. Cette convergence est moins nette au sujet de la jonction mixte asymétrique qui semble continuer à décroître sans explication évidente. Ces courbes étant assez bruitées, les valeurs des coefficients que nous retiendrons correspondent aux moyennes en fin de courbes. Les plages de contraintes utilisées pour le calcul des coefficients d'interaction sont illustrées en figure III.10 et le jeu de coefficients ainsi obtenus est reporté dans le tableau III.6.

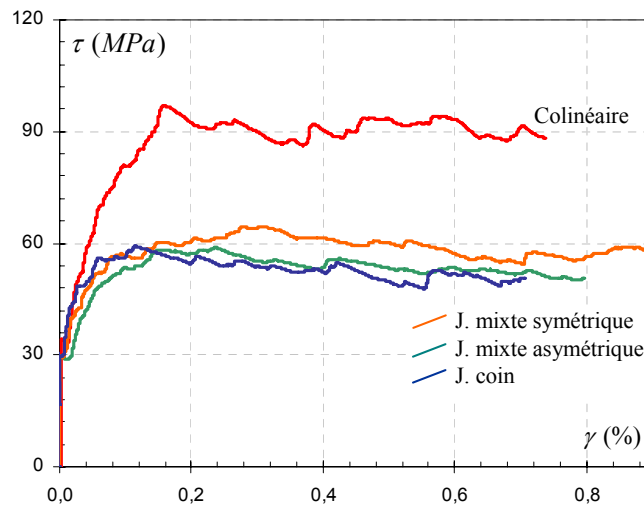


Figure III.9. Courbes de déformations issues des simulations de l'érouissage latent pour les différentes interactions.

Au final les observations faites jusqu'à présent se trouvent confirmées. L'interaction colinéaire est de loin l'interaction la plus forte. Son coefficient d'interaction est dix fois supérieur à ceux relatifs aux jonctions. Ensuite, parmi les jonctions, la mixte symétrique est la plus forte. Les deux dernières interactions sont sensiblement de même intensité, la jonction mixte asymétrique demeure légèrement plus faible.

Il est intéressant de noter que la hiérarchie entre les coefficients donne le même classement que l'étendue des domaines de réactions observée dans les cartographies d'interaction (*cf.* figure III.2) [Madec 2001]. Ensuite, comme cela avait déjà été discuté par Madec et Kubin [Madec et Kubin 2004b], les coefficients associés aux jonctions sont plus faibles que leurs homologues dans la structure CFC (*cf.* tableaux III.3 et III.4). Une des raisons est due à la minimisation énergétique qui est plus intéressante dans le cas des jonctions du CFC. L'énergie des dislocations est proportionnelle à  $b^2$ . Dans le cas des jonctions des matériaux CC, le rapport entre les énergies des configurations initiales (proportionnel à  $b_1^2 + b_f^2$ ) et après réaction ( $\propto b_f^2$ ) est de 3/2. Alors que ce même rapport vaut 2 dans l'exemple de la jonction de Lomer des matériaux CFC.

La très grande force de l'interaction colinéaire est liée à plusieurs raisons. (i) Elle conduit notamment à une minimisation de l'énergie considérable, la résultante de cette recombinaison possédant un vecteur de Burgers nul. (ii) Après l'annihilation, les dislocations ne sont plus retenues contrairement aux jonctions qui exercent une force de rappel sur les nœuds triples. Ainsi, les dislocations s'éloignent et réduisent leur longueur, devenant ainsi plus difficile à courber par la suite.

Il est intéressant de noter que le coefficient associé aux interactions dipolaires est inférieur

de pratiquement un ordre de grandeur en comparaison avec les coefficients des jonctions. Signe s'il en fallait, que les interactions de contacts sont bien plus importantes, et justifie à posteriori les premières études de la forêt qui se sont focalisées sur les interactions entre systèmes sécants.

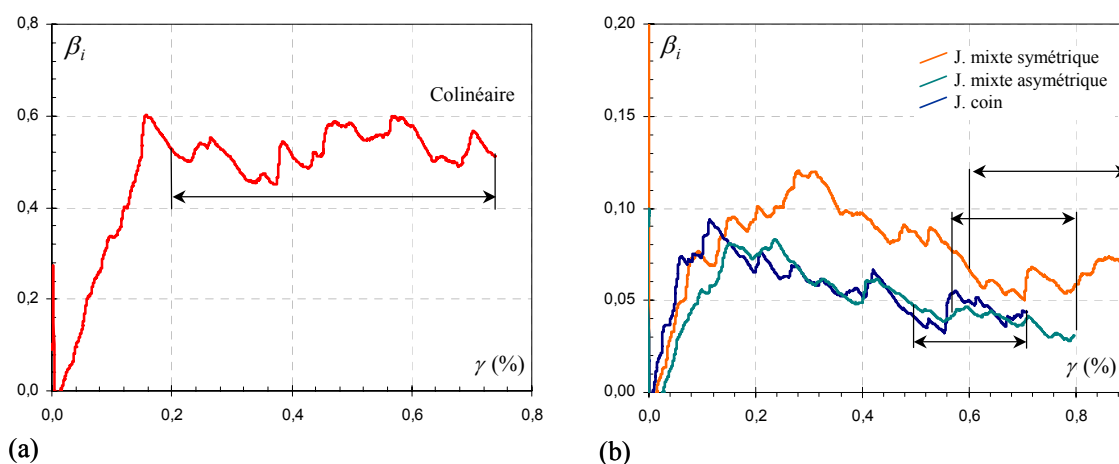


Figure III.10. Evolution des coefficients d'interaction avec le cisaillement. Les domaines sur lesquels les coefficients ont été calculés sont représentés.

Tableau III.6. Valeurs des différents coefficients d'interaction  $\beta_i$  calculées à partir des simulations de l'écroutissage latent.

Réaction	Dipolaire et coplanaire	J. mixte symétrique	J. mixte asymétrique	J. coin	Colinéaire
Coefficient	$0,0068 \pm 0,001$	$0,063 \pm 0,006$	$0,036 \pm 0,006$	$0,039 \pm 0,005$	$0,53 \pm 0,04$

### Effet de la friction d'alliage

Les coefficients, qui viennent d'être introduits, ont été définis pour un matériau industriel qui contient un certain nombre d'impuretés, associées à une friction d'alliage de 30 MPa. La valeur de cette dernière est relativement importante, elle est même comparable à la contribution des jonctions seules. Pour tester l'effet de la friction d'alliage, les simulations de l'écroutissage latent sont répétées, avec une friction d'alliage cette fois négligeable de 5 MPa. Elle n'est pas fixée à zéro, afin de limiter les oscillations des dislocations lorsque leur mouvement est peu freiné. Pour simplifier, ces simulations sont nommées sans friction d'alliage.

Les différentes courbes de déformation présentées en figure III.11, font apparaître que la hiérarchie des interactions est identique à celle précédente. Le jeu de coefficients calculés à partir de ces courbes est donné dans le tableau, et comparé à celui obtenu avec une forte friction d'alliage. L'accord entre les paires de coefficients avec et sans friction d'alliage est plutôt bon

en considérant les incertitudes sur ces valeurs. L'accord est toutefois meilleur pour les deux jonctions faibles (mixte asymétrique et coin).

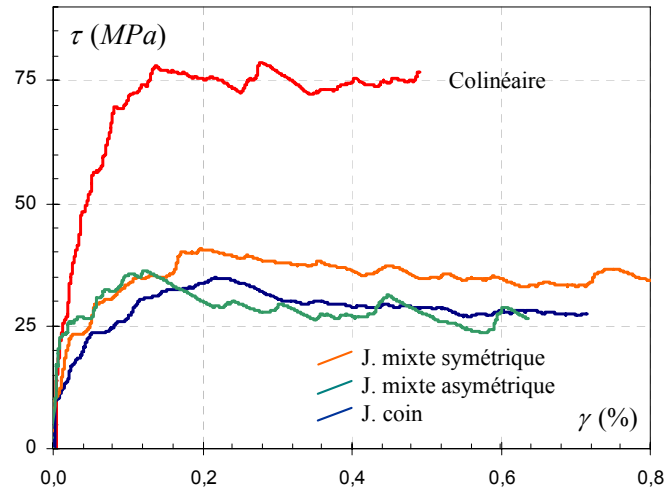


Figure III.11. Courbes de déformations issues des simulations de l'écroutissage latent pour les différentes interactions, avec une friction d'alliage de 5 MPa.

Tableau III.7. Effet de la friction d'alliage sur les coefficients d'interaction obtenus par la DD.

Réaction	J. mixte symétrique	J. mixte asymétrique	J. coin	Colinéaire
$\tau_F = 30$ MPa	$0,063 \pm 0,006$	$0,036 \pm 0,006$	$0,039 \pm 0,005$	$0,53 \pm 0,04$
Sans friction d'alliage	$0,074 \pm 0,007$	$0,040 \pm 0,007$	$0,042 \pm 0,003$	$0,7 \pm 0,03$

Monnet et Devincré [Monnet et Devincré 2005] ont montré, à l'aide de la DD, que la friction d'alliage peut affecter de manière significative le mécanisme de la forêt en abaissant la valeur des coefficients. La friction d'alliage écrante les interactions entre les dislocations à une distance  $\mu b / \tau_F$  et, par conséquent, réduit la longueur des jonctions. Cette distance  $\mu b / \tau_F$  vaut approximativement  $0,7 \mu\text{m}$  dans le cas des aciers de cuve. Il faut alors comparer cette distance à celle caractéristique du mécanisme de la forêt  $1 / \sqrt{\beta_f \rho_f}$  (cf. section III.1.4) qui varie entre  $0,3$  et  $1 \mu\text{m}$  suivant l'interaction considérée. Ceci explique que l'effet de la friction d'alliage demeure faible et montre ainsi le bon accord avec l'analyse proposée par Monnet et Devincré [Monnet et Devincré 2005]. Dans la suite de ce travail, on préférera néanmoins utiliser le jeu de coefficients obtenus avec une forte friction d'alliage pour deux raisons. Ils sont associés à des incertitudes plus faibles et la résolution numérique des équations de mouvement est meilleure dans ce cas.

### Comparaison avec les coefficients de la littérature

Dans la mesure où la friction d'alliage affecte peu le mécanisme de la forêt, on peut procéder à la comparaison de nos résultats avec ceux proposés par Madec et Kubin [Madec et Kubin 2004b]. Comme nous l'avons vu dans la partie III.1.4, les principales différences entre les deux études sont liées à la densité de référence de la forêt, prise comme  $10^{12} \text{ m}^{-2}$  pour Madec et Kubin, et à la configuration d'obstacles construite à partir d'arbres de la forêt courts. Les jeux de coefficients ne peuvent pas être comparés tels quels à cause des différences de densités de la forêt. Il est en effet nécessaire de corriger notre jeu de coefficients à l'aide des rapports logarithmiques (cf. l'équation III.4).

Tableau III.8. Comparaison entre les jeux de coefficients d'interactions obtenus par Madec et Kubin [Madec et Kubin 2004b] et ceux de cette étude, corrigés pour correspondre à une densité de dislocations de la forêt de  $10^{12} \text{ m}^{-2}$ .

Réaction	J. mixte symétrique	J. mixte asymétrique	J. coin	Colinéaire
$\rho_{ref} = 2 \cdot 10^{13} \text{ m}^{-2}$	$0,063 \pm 0,006$	$0,036 \pm 0,006$	$0,039 \pm 0,005$	$0,53 \pm 0,04$
$\rho_f = 10^{12} \text{ m}^{-2}$	0,088	0,05	0,055	0,072
Madec ( $\rho_f = 10^{12} \text{ m}^{-2}$ )	0,06	0,04	0,045	0,55

En premier lieu, comme le montre la comparaison des deux jeux de coefficients donnée dans le tableau III.8, la hiérarchie entre les interactions est identique. Les différences relatives entre les forces des différentes interactions sont d'ailleurs très similaires au sein d'un même jeu. En revanche, les valeurs obtenues par Madec et Kubin sont systématiquement inférieures aux mesures réalisées ici. Il existe des différences de l'ordre de 20 % à 30 % suivant les interactions. Il est possible d'expliquer des différences par ces divergences entre les configurations des sources de la forêt de ces deux études. Madec et Kubin [Madec et Kubin 2004b] ont travaillé avec des sources de  $2\rho_f^{-1/2}$  et nous avons montré qu'en dessous de  $4\rho_f^{-1/2}$  la longueur de la forêt diminue la valeur des coefficients d'interaction. Cet abaissement est de l'ordre de 25 % comme le révèle la figure III.7. L'essentiel de l'écart entre ces deux jeux de coefficients est donc bien expliqué par les différences concernant la configuration de la forêt dont l'influence est désormais bien comprise. Correction faite des différences de configuration initiale, il existe un bon accord entre les deux études. Ceci démontre la fiabilité de la détermination des coefficients d'interaction par simulations de l'écroissage latent, même quand celles-ci sont réalisées par deux codes de DD différents.

Il faut mentionner que Madec et Kubin [Madec et Kubin 2007] ont très récemment réalisé de nouvelles simulations de l'écroissage latent, partant toujours d'une densité de forêt de  $10^{12} \text{ m}^{-2}$ .



Ils obtiennent un coefficient d'interaction pour la jonction mixte symétrique de  $0,102 \pm 0,002$ , qui est en meilleur accord avec nos résultats.

### III.2.3. Validation : simulation du glissement double

Les paragraphes précédents ont détaillé la manière de définir les coefficients d'interaction, et ce travail reprend un certain nombre de propositions de travaux antérieurs [Madec *et al.* 2003, Devincré *et al.* 2006]. Toutefois, l'approche adoptée ici diffère des précédentes études par trois aspects : (i) les interactions dipolaires sont supprimées en post traitement au moyen d'un coefficient d'interaction dédié à ces interactions. (ii) Les simulations utilisent des arbres de la forêt de grandes tailles pour éviter d'introduire une dépendance des résultats sur la configuration de la forêt. (iii) La prise en compte du terme logarithmique de l'énergie de ligne semble incontournable, vu les densités utilisées ici. Souhaitant valider ces choix et puisque la finalité de ce travail est de fournir un modèle prédictif efficace, nous allons procéder à un test comme cela est désormais classique [Madec *et al.* 2003, Devincré *et al.* 2006]. Pour cela, une simulation massive mettant en jeu les douze systèmes de plan  $\{110\}$  est réalisée. Le test sera d'autant plus probant que les conditions de cette simulation seront éloignées de celles utilisées lors de la détermination des coefficients d'interaction.

#### Prédiction des systèmes actifs

Tableau III.9. Facteurs de Schmid  $m$  sur les différents systèmes pour la traction suivant l'axe  $[\bar{1}13]$ .

Système n°	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
$m$	0	0,15	0,15	0,22	0,45	0,22	0	0,37	0,37	0,22	0,22	0,45

La densité de dislocations totale  $\rho_{\text{tot}}$  est prise égale à  $5 \cdot 10^{13} \text{ m}^{-2}$ . Elle est répartie uniformément sur les douze systèmes. Les différentes dimensions de la simulation sont adaptées à la distance moyenne entre dislocations  $\rho_{\text{tot}}^{-1/2}$ , ici égale à  $0,13 \text{ }\mu\text{m}$ . Ainsi, le volume de simulation est de  $1,1 \text{ }\mu\text{m}$  de côté ( $9 \rho_{\text{tot}}^{-1/2}$ ). La configuration initiale est construite à partir de boucles dipolaires. Ces dernières sont formées de quatre dislocations coins qui appartiennent successivement à un système puis à un de ses déviés. Cette solution permet d'éviter l'introduction de points d'ancrage artificiels. D'une taille unique de  $1 \text{ }\mu\text{m}$ , ces boucles sont distribuées aléatoirement dans le volume de simulation. La taille des boucles n'est pas un point critique, hormis pour la situation limite de 1 ou  $2 \rho_{\text{tot}}^{-1/2}$ . Quelques tests ont permis de le vérifier. En l'absence de point d'ancrage, le développement de la microstructure se fait plus librement.

La longueur des jonctions est en effet seulement contrôlée par la courbure des dislocations entre deux réactions.

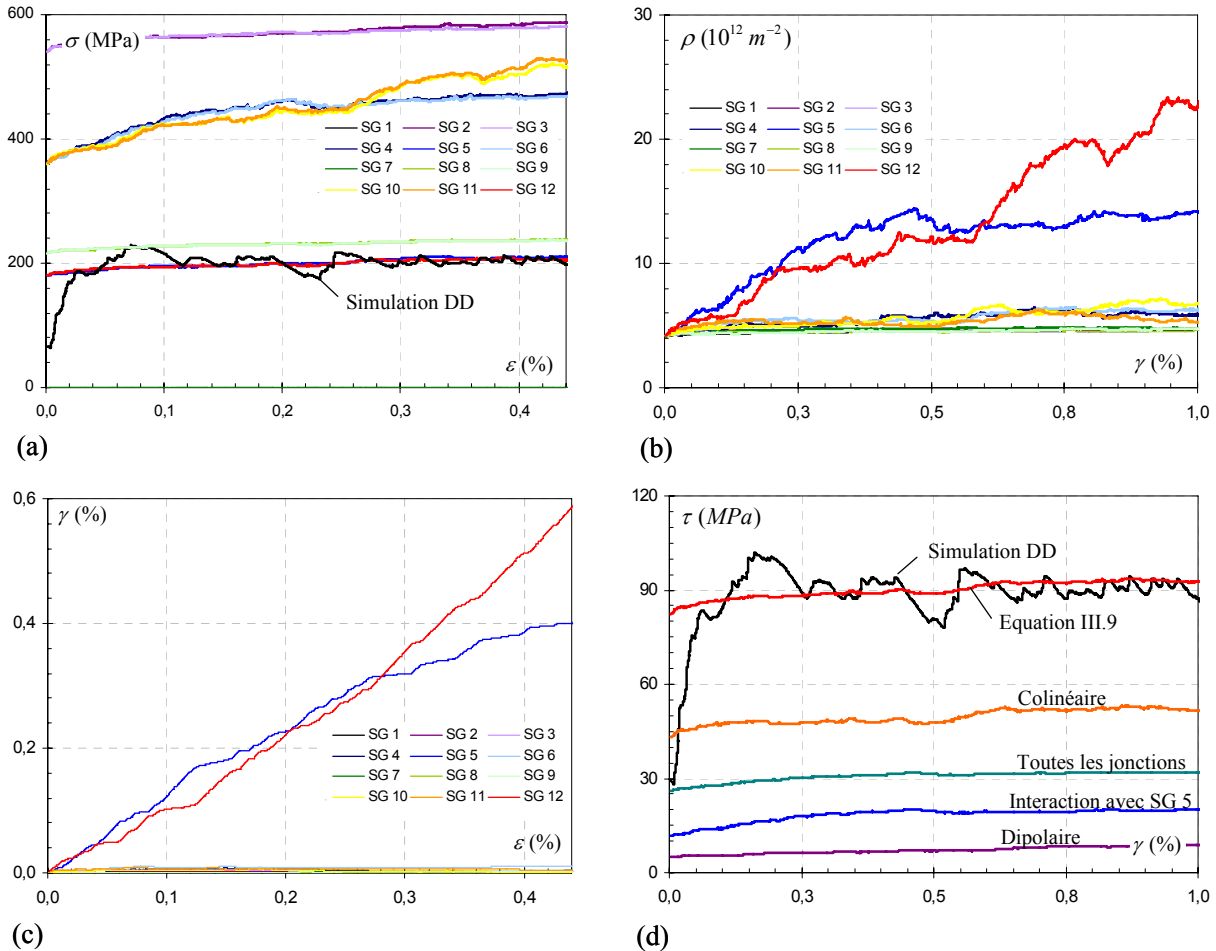


Figure III.12. (a) Comparaison des différentes contraintes d'activation  $\sigma^i$  du système  $i$  calculées à partir de l'équation III.9 et des facteurs de Schmid. (b) Evolution des densités de dislocations sur chacun des systèmes de glissement au cours de la déformation plastique. (c) Evolution des cisaillements fournis par chaque système au cours de la déformation. (d) Comparaison entre la cission critique prédite et les résultats de la simulation. Les contributions des différentes interactions sont également reportées. La manière dont elles sont calculées est détaillée dans le texte.

Le choix de l'axe de sollicitation se porte sur l'axe  $[\bar{1}13]$  qui se situe au milieu de la frontière  $[001]-[\bar{1}11]$  du triangle standard. Deux domaines d'activation des systèmes  $\{110\}$  coïncident sur cette zone, ce qui a été confirmé par des observations expérimentales de glissement double [Jaoul et Gonzales 1960, Keh 1964, Franciosi 1983]. Il s'agit ici des systèmes  $\frac{1}{2} [111] (10\bar{1})$  (n°5 du tableau III.1) et  $\frac{1}{2} [11\bar{1}] (011)$  (système n°12) qui ont des facteurs de Schmid initialement égaux (*cf.* tableau III.9). Cette direction de chargement est instable dans la

mesure où la déformation plastique tend à la tourner vers l'axe de haute symétrie  $[\bar{1}11]$ , qui lui est stable. Tenir compte de la rotation du cristal, sur des volumes de simulation aussi petits que ceux utilisés par la DD n'est pas chose facile. C'est pourquoi un des deux systèmes de glissement prend le dessus. Il s'agit du système n°12 dans le cas de cette simulation. La figure III.12.a donne l'évolution de la contrainte d'écoulement simulée au cours de la déformation plastique. La courbe présente un faible pic de multiplication aux alentours de  $\gamma = 0,2$  %. Un écrouissage se devine malgré la présence de fluctuations assez importantes. Ecrouissage que l'on peut mettre en parallèle avec l'augmentation des densités par systèmes donnée en figure III.12.b.

Le jeu des coefficients d'interaction et l'approche adoptée dans ce travail vont être testés en deux temps. Il s'agit de vérifier que nous pouvons : (i) retrouver les bons systèmes actifs et (ii) décrire correctement la contrainte d'écoulement. Pour cela, nous partons de la relation (équation III.4) proposée par Devincré *et al.* [Devincré *et al.* 2006] dans le cas d'une unique interaction. Le coefficient d'interaction intervient à l'intérieur même du terme logarithmique. Dans le cas de la superposition de plusieurs durcissements, il est nécessaire de distinguer un rapport logarithmique pour chaque type d'interaction. Il doit donc être appliqué à chaque coefficient sous la racine. Ainsi l'équation III.4 devient dans le cas d'interactions multiples :

$$\tau_c^i = \mu b \sqrt{\sum_j \chi \beta^{ij} \rho^j} + \tau_F \quad \text{Équation III.9}$$

Avec  $\chi$  le rapport logarithmique qui est fonction à la fois du coefficient d'interaction  $\beta^{ij}$ , de la densité  $\rho_{ref}$  à laquelle ce dernier est calculé.  $\rho^j$  est la densité totale sur tous les systèmes qui conduisent à la même interaction  $j$ .  $\chi$  s'écrit de la manière suivante :

$$\chi = \left[ \frac{\ln\left(b\sqrt{\beta^{ij} \rho^j}\right)}{\ln\left(b\sqrt{\beta^{ij} \rho_{ref}}\right)} \right]^2 \quad \text{Équation III.10}$$

La nature des interactions entre la totalité des systèmes est définie par la matrice d'interaction donnée en annexe. La cission critique  $\tau_c^i$  sur chaque système  $i$  est calculée à partir de l'équation III.9 et des densités données par la simulation (*cf.* figure III.12). Le coefficient associé à l'interaction coplanaire est supposé identique à celui de la dipolaire. Ces deux interactions sont, en effet, assez semblables puisqu'elles sont sans contact. Enfin les contraintes  $\sigma^j$  sont déterminées à partir des facteurs de Schmid donnés dans le tableau III.9. La figure III.13.a compare les différentes contraintes d'activation  $\sigma^j$  de tous les systèmes. Premièrement, les systèmes n° 5 et 12 présentent les mêmes contraintes  $\sigma^j$  qui sont les plus basses en comparaison avec les autres systèmes moins bien orientés. Deuxièmement, la contrainte d'activation de ces deux systèmes est bien la contrainte d'écoulement mesurée par la

simulation massive. La figure III.12.c montre également que ces deux systèmes fournissent très nettement la majeure partie de la déformation plastique. Le modèle permet même de retrouver la déformation  $\varepsilon = 0,3 \%$  à partir de laquelle le système n° 12 devient ainsi plus actif que le système n°5.

### Prédiction de la contrainte d'écoulement

A présent qu'il est vérifié que le modèle prédit correctement le système actif, nous pouvons comparer la contrainte d'écoulement  $\tau_c$  et la cission critique sur le système n°12. Ceci est reporté en figure III.13.d. En considérant les fluctuations de la contrainte d'écoulement simulée, la prédiction de l'équation III.9 est en très bon accord avec les résultats de la simulation. La présentation de ces résultats est maintenant prolongée par la discussion de différents points.

Tout d'abord disposer d'un modèle tenant compte de la variété des interactions qui interviennent lors de la déformation permet de déterminer la contribution de chacune d'elle. En ce sens, on définit la contribution de chaque interaction par :

$$\tau_j = \mu b \sqrt{\chi \beta_j \rho_j} \quad \text{Équation III.11}$$

$\rho_i$  est la densité totale des systèmes formant la même réaction  $j$  avec le système n°12. Il faut noter que les contributions se superposent suivant une loi de mélange quadratique pour donner la contrainte critique totale du système n°12. Les évolutions des différentes contributions sont reportées dans la figure III.12.d. Les interactions colinéaires représentent la contribution prépondérante, bien que la densité des systèmes équivaille à un dixième de la densité totale. Les jonctions constituent ensuite la seconde contribution. Les interactions dipolaires (et coplanaires) ne représentent qu'une petite contribution, la densité du système n°12 ayant seulement été multipliée par un facteur cinq. L'interaction avec le second système actif (n°5), qui implique une jonction forte (mixte symétrique) induit la contribution majeure des jonctions. Cette analyse montre que la contrainte d'écoulement mesurée dans cette simulation n'est pas le fruit de la seule interaction entre les deux systèmes actifs, mais plutôt le produit de l'ensemble des contributions de la forêt.

Comme nous l'avons discuté au début du chapitre, définir un coefficient d'interaction unique ne permet pas de reproduire l'anisotropie du comportement du monocristal qui met en jeu des interactions de natures différentes. En revanche, la définition d'un coefficient d'interaction moyen  $\alpha$ , représentatif du début de l'écoulement plastique, peut être intéressant pour des modèles simples. En assurant l'égalité entre  $\tau_c = \alpha \mu b \sqrt{\rho} + \tau_F$  et équation III.9, il suit une relation simple entre le coefficient moyen  $\alpha$  et les coefficients  $\beta_j$ :

$$\alpha = \sqrt{\frac{\sum \chi \beta_j \rho_j}{\rho_{tot}}} \quad \text{Équation III.12}$$

Dans le cas présent,  $\rho_{tot}$  est égal à  $5 \cdot 10^{13} \text{ m}^{-2}$  ce qui représente une densité  $\rho_j = 4,2 \cdot 10^{12} \text{ m}^{-2}$  sur chaque système  $j$ . Il suit un coefficient d'interaction  $\alpha$  de 0,34. Il faut noter que (i) cette valeur est en définitive proche de celle estimée par l'expérience qui vaut 0,3 [Keh 1964] ; (ii) ce coefficient est valable au début de l'écoulement plastique et dans l'hypothèse d'une répartition uniforme de la densité sur tous les systèmes {110}.

Enfin la courbe de déformation prédite en figure III.12.d fait apparaître un écrouissage de 5 MPa entre 0,2 et 1 % de cisaillement. Ce qui correspond à un taux d'écrouissage  $\theta$  valant  $\mu/130$ . L'ordre de grandeur est correct mais cette valeur est un peu plus forte que les taux d'écrouissage observés expérimentalement en glissement double (*cf.* chapitre I et [Jaoul et Gonzales 1960, Keh 1964]). Il est fort probable que ce durcissement, observé aux faibles déformations de la simulation, corresponde encore au régime transitoire pour lequel des systèmes à priori inactifs se multiplient un peu, avant de s'arrêter. C'est le cas en particulier des systèmes colinéaires. Ceci est confirmé par l'écrouissage de la courbe prédite qui semble très légèrement saturer.

Les résultats de cette partie valident clairement la démarche adoptée et la valeur des coefficients d'interaction. Le modèle proposé dans ce travail permet à la fois de bien reproduire la contrainte d'écoulement associée à la forêt et l'écrouissage associé au glissement double.

### **Analyse des longueurs de jonctions**

Comme nous l'avons déjà montré, la longueur des sources de la forêt modifie la longueur des jonctions et par conséquent affecte également la valeur des coefficients. Devincre *et al.* [Devincre *et al.* 2006] ont discuté de ce point en comparant les histogrammes de longueurs de jonctions  $l_j$  observés (i) lors d'une simulation en glissement multiple ne mettant pas en jeu de point d'ancrage (ii) lors des simulations de l'écrouissage latent qui utilisent des dislocations ancrées pour construire la configuration de la forêt. Comme la stabilité des jonctions est liée à leur longueur, les deux histogrammes doivent correspondre. Dans le cas contraire, il est possible que les coefficients donnent une mauvaise indication sur la force de la réaction. Cette démarche est reprise ici pour pousser plus loin la discussion de nos résultats. La figure III.13 compare les histogrammes de longueurs des jonctions obtenus en fin de simulations de l'écrouissage latent et celui issu de la simulation du glissement double suivant [I 13]. Par souci de concision, nous ne présentons que l'histogramme concernant les jonctions coins.

Les deux distributions présentent la même allure et coïncident assez bien. Elles ont toutes deux une forte densité de jonctions de longueur très faible voir nulle, signe de l'existence de nombreux états croisés attractifs. Ensuite, la proportion de jonctions diminue fortement avec la longueur des jonctions  $l_j$ . Les longues jonctions supérieures à  $0,7 \rho_f^{-1/2}$  sont assez peu représentées. Ce bon accord se retrouve également au sujet de la longueur moyenne des jonctions qui est calculée à partir des deux histogrammes de la figure III.14. Elle est de

$0,16 \rho_f^{-1/2}$  dans le cas de la simulation de la traction, ce qui est comparable à la valeur de  $0,2 \rho_f^{-1/2}$  dans le cas des jonctions faibles. Ceci valide ainsi notre choix concernant la longueur des arbres de la forêt.

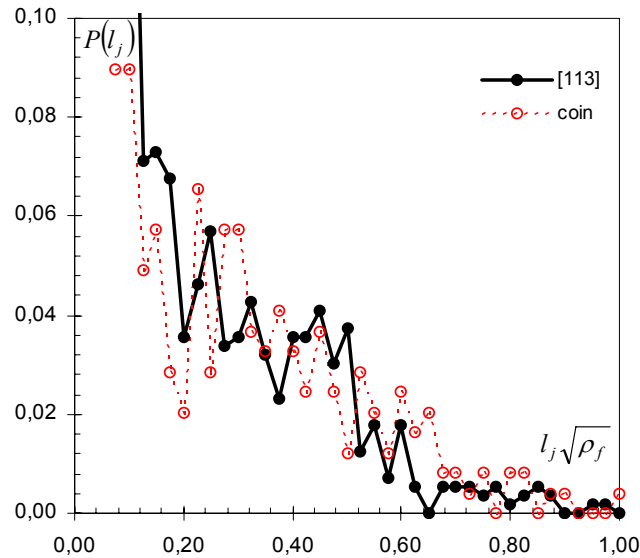


Figure III.13. Histogrammes de distribution des longueurs de jonctions  $l_j$ , obtenus en fin de simulations de l'érouissage latent et de la traction suivant l'axe  $[\bar{1}13]$ .

### Vers un modèle pour l'évolution de la densité primaire

Comme cela a été évoqué au début de ce chapitre, il semble difficile, à l'heure actuelle, de définir par la DD les lois d'évolution des densités. Toutefois nous allons montrer qu'à partir de quelques hypothèses simples et des données expérimentales, il est possible de donner un ordre de grandeur des paramètres intervenant dans l'équation III.3. Cette démarche reprend le formalisme proposé par Kocks et Mecking [Mecking et Kocks 1981, Kocks et Mecking 2003]. En partant du produit entre la contrainte d'écoulement et le taux d'érouissage, il suit :

$$\tau_c \frac{d\tau_c}{d\gamma} = \frac{(\alpha\mu b)^2}{2} \frac{d\rho}{d\gamma} \quad \text{Équation III.13}$$

La loi d'écoulement est ici écrite sous forme scalaire (*cf.* équation III.1) pour simplifier. Dans un premier temps, le terme de restauration dynamique qui intervient dans l'équation III.3 peut être négligé. Il s'agit d'une approximation tout à fait acceptable concernant le stade I, et au moins le début du stade II [Kocks et Mecking 2003, Hoc *et al.* 2004]. Cela permet d'exprimer le taux d'érouissage  $\theta$  comme:  $\frac{\theta}{\mu} = \frac{\alpha}{2\sqrt{\rho}} \frac{1}{\Lambda}$ . Il découle ainsi une relation simple entre le libre

parcours moyen  $\lambda$  et la densité de dislocations de la forme  $\lambda = k/\sqrt{\rho}$  [Estrin 1999] :

$$\lambda = \frac{\alpha\mu}{2\theta\sqrt{\rho}} \quad \text{Équation III.14}$$

Le taux d'écroissage est défini à partir de données expérimentales. Dans le fer pur, il est de l'ordre de  $\mu/2000$  pour le stade I et de  $\mu/800$  au début du stade II [Keh 1964, Jaoul et Gonzales 1961]. Nous avons précédemment proposé une estimation du coefficient d'interaction  $\alpha$  égal à 0,34. Nous allons supposer que ce coefficient est identique en stade I et II, ce qui est bien évidemment une hypothèse très simplificatrice, puisque les interactions et densités mises en jeu sont très différentes. Mais l'objectif, ici, est seulement de fournir une estimation de  $\lambda$ . Par ce moyen, le coefficient  $k = \alpha\mu/2\theta$  est estimé à 340 pour le stade I, et s'abaisse à 140 pour le stade II. A priori le libre parcours moyen dépend des systèmes mis en jeu en tant qu'obstacles. Mais on va simplement supposer que ce coefficient  $k$  est valable quels que soient la nature et le nombre d'interactions qui se produisent. Finalement, pour la densité de dislocations utilisée dans ce travail, le libre parcours moyen est égal à 34  $\mu\text{m}$  dans le cas du glissement simple et à 14  $\mu\text{m}$  pour le glissement double.

Il est à présent intéressant de confronter ce modèle relativement simple avec les résultats de la simulation précédente du glissement double. La densité moyenne au cours de la simulation se situe aux alentours de  $8 \cdot 10^{13} \text{ m}^{-2}$ . Le libre parcours moyen  $\lambda = 140/\sqrt{\rho}$  est dans ce cas égal à 16  $\mu\text{m}$ . Par ce moyen, le taux de stockage sur le système primaire  $\frac{d\rho}{d\gamma}$  est estimé à  $2,5 \cdot 10^{13} \text{ m}^{-2}/\%$ .

Cette valeur est très proche de la pente moyenne de  $2 \cdot 10^{13} \text{ m}^{-2}/\%$  observée sur l'évolution du système le plus actif (n°12) en figure III.13.b. Une explication possible de la différence entre le modèle et la simulation vient peut-être de la baisse d'activité du système n°5 en fin de simulation. On retiendra simplement que l'ordre de grandeur du stockage est bien reproduit par un modèle simple, issu des travaux de Kocks et Mecking [Kocks et Mecking 2003], pour les matériaux CFC.

Concernant le terme de restauration, une solution simple ne peut être fournie, puisqu'il existe peu d'informations concernant le glissement dévié dans le fer (*cf.* chapitre I). Une solution consisterait à procéder par approche inverse. En particulier des courbes expérimentales  $\tau_c\theta$  en fonction de  $\tau_c$  ont notamment permis d'atteindre, les paramètres du stockage et de la restauration, dans le cas des CFC [Estrin 1996]. Néanmoins, il n'existe pas à notre connaissance, dans la littérature, de telles courbes pour le fer.

### Microstructure simulée des dislocations

Cette simulation massive est également l'occasion de discuter des microstructures des dislocations qui se développent au cours de la déformation. La microstructure simulée, donnée

en figure III.9, a été observée sous chargement après 1 % de cisaillement.

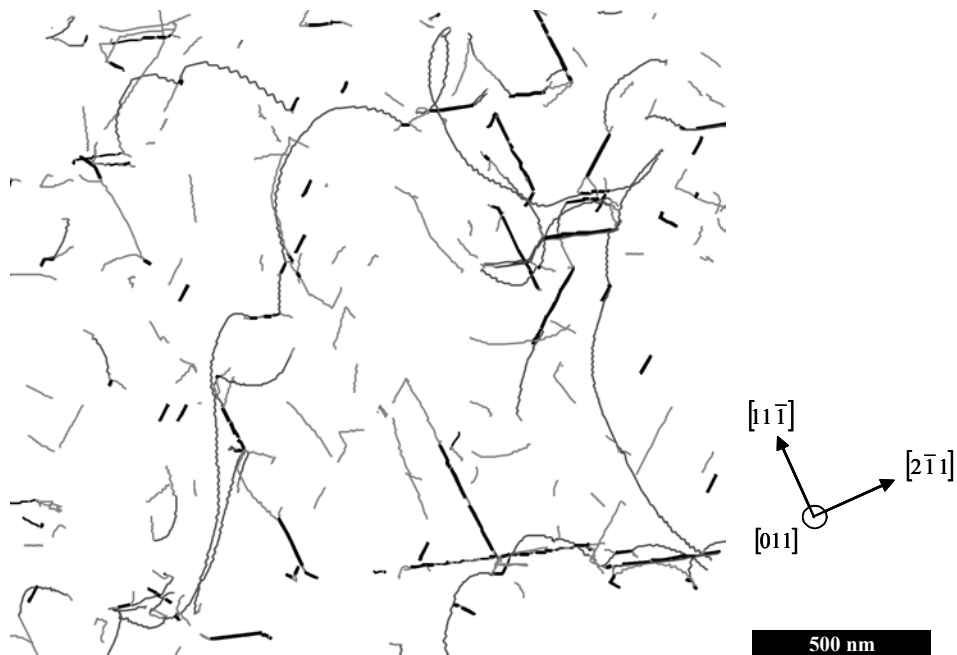


Figure III.14. Lamme mince obtenue sous chargement après 1% de cisaillement lors de la simulation d'une traction suivant  $[11\bar{3}]$ . L'épaisseur de la lamme est de  $0,1\ \mu\text{m}$ . Le plan d'observation coïncide avec le plan de glissement du système actif.

Quelques-unes des observations réalisées au cours des simulations de l'écroutissage latent se retrouvent ici. Notamment la différence de courbure que doivent atteindre les dislocations primaires pour se libérer des différents obstacles. Les interactions colinéaires jouent un rôle important dans le développement de la microstructure au cours de la déformation, dont on peut voir certaines manifestations dans cette lamme mince. Certaines annihilations ancrent les dislocations (notamment celle appartenant aux systèmes actifs). Elles permettent de sectionner les dislocations ce qui les empêche de s'allonger indéfiniment. Ce résultat est conforme aux observations expérimentales [Keh 1964]. Les simulations de DD menées par Devincere *et al.* [Devincere *et al.* 2007] ont montré que l'interaction colinéaire explique le développement de la microstructure typique du stade I des CFC. L'annihilation s'accompagne souvent de la formation de débris : des petites boucles dipolaires et des super-crans, trop petits pour être activés à un niveau de contrainte raisonnable. L'interaction colinéaire participe ainsi au stockage des dislocations, ce que Madec et Kubin [Madec et Kubin 2004b] avaient observé au cours de leurs simulations de l'écroutissage latent. Il s'agit donc d'un mécanisme indispensable à la compréhension de l'écroutissage de la forêt.



## Résumé

---

Le durcissement associé aux interactions entre dislocations met en jeu la racine carrée des densités des systèmes, pondérées par des coefficients d'interactions. Ces derniers mesurent l'intensité moyenne des interactions entre deux systèmes. Ce sont les paramètres clef d'un modèle de plasticité cristalline. Après avoir introduit les différentes interactions entre les systèmes de plans  $\{110\}$ , les coefficients d'interaction sont déterminés à l'aide de simulations de l'écrouissage latent. Les simulations menées dans cette étude diffèrent de celles de la littérature par plusieurs aspects : (i) l'introduction d'une friction d'alliage et une forte densité de dislocations, pour ce qui concerne les paramètres liés au matériau ; (ii) la construction de la configuration des dislocations de la forêt et (iii) la suppression en post-traitement des interactions dipolaires, qui peuvent affecter la mesure des coefficients.

Une étude de sensibilité est effectuée dans l'objectif de bien comprendre les différents paramètres qui entrent en jeu lors des simulations de l'écrouissage latent. Elle porte sur certains paramètres de contrôle, ainsi que sur la configuration initiale de la simulation. Les résultats obtenus sont en accord qualitatif avec la seule étude similaire réalisée par Madec et Kubin [Madec et Kubin 2004b]. La différence quantitative qui existe entre les deux jeux de résultats est expliquée par des différences concernant la configuration initiale de la forêt. Nos résultats montrent que la friction d'alliage des aciers de cuve affecte assez peu le mécanisme de la forêt.

Les différents choix adoptés dans ce travail sont validés au moyen d'une simulation massive indépendante. Le modèle, proposé ici, donne une très bonne prédiction à la fois de la contrainte d'écoulement simulée et des évolutions des densités participant à la déformation.

---

**Bibliographie**

- [Barlat *et al.* 2002] F. Barlat, M.V. Glazov, J.C. Brem, D.J. Lege, *Int. J. Plast.* **19**, 919 (2002).
- [Bittencourt *et al.* 2002] E. Bittencourt, A. Needleman, M. E. Gurtin, E. Van der Giessen, *J. Mech. Phys. Sol.* **51**, 281 (2003).
- [Bulatov *et al.* 1998] V. Bulatov, F. F. Abraham, L. Kubin, B. Devincere, S. Yip, *Nature* **391**, 669 (1998).
- [Busso et Cailletaud 2004] E. P. Busso, G. Cailletaud, *Int. J. Plast.* **21**, 2212 (2005).
- [Devincere et Kubin 2007] B. Devincere, L. P. Kubin, Communication personnelle 2007.
- [Devincere *et al.* 2007] B. Devincere, L. Kubin, T. Hoc, *Scripta Mat.* **57**, 905 (2007).
- [Dupuy et Fivel 2002] L. Dupuy, M.C. Fivel *Acta Mater.* **50**, 4873 (2002).
- [Estrin 1996] Y. Estrin, *Unified Constitutive Laws of Plastic Deformation*. Academic Press USA, 69 (1996).
- [Estrin 1999] Y. Estrin, *NATO ASI series E applied sciences*, Kluwer Academic Publishers, 339 (1999).
- [Estrin et Mecking 1984] Y. Estrin, H. Mecking, *Acta Metall.* **32**, 57 (1984).
- [Fivel 1994] M. Fivel, Thèse de doctorat de l'Institut Nationale Polytechnique de Grenoble (1994).
- [Fivel *et al.* 1998] M. Fivel, L. Tabourot, E. Rauch, G.R. Canova, *J Phys IV* **8**, 151 (1998).
- [Foreman 1967] A.J.E. Foreman, *Phil. Mag.* **15**, 1011 (1967).
- [Foreman et Makin 1966] A. J. E. Foreman, M. J. Makin, *Phil. Mag.* **13**, 911 (1973).
- [Franciosi 1983] P. Franciosi, *Acta Metall.* **31**, 1331 (1983).
- [Franciosi 1985] P. Franciosi, *Acta Metall.* **33**, 1601 (1985).
- [Franciosi, 1984] P. Franciosi, Thèse de doctorat de l'Université Paris-Nord (1984)
- [Friedel 1964] J. Friedel, dans *Dislocations*, Pergamon Press, Oxford (1964).
- [Ghosh et Olson 2002] G. Ghosh, G. B. Olson, *Acta Mater.* **50**, 2655 (2002).
- [Hirth et Lothe 1982] J. P. Hirth, J. Lothe, dans *Theory of dislocations*, Malabar Florida Krieger Publishing Company (1982).
- [Hoc *et al.* 2001] T. Hoc, C. Rey, J. L. Raphanel, *Acta Mater.* **49**, 1835 (2001).
- [Hoc *et al.* 2003] T. Hoc, J. Crepin, L. Gélébart, A. Zaoui, *Acta Mater.* **51**, 5477 (2003).
- [Hoc *et al.* 2004] T. Hoc, B. Devincere, L.P. Kubin 25th Riso International Symposium on Materials Science **43**, (2004).
- [Honeycombe 1968] R.W.K. Honeycombe, dans *The Plastic Deformation of Metals*, Edward Arnold Ltd., London (1968).

- [Jaoul et Gonzales 1960] B. Jaoul, D. Gonzalez, *J. Mech. Phys. Solids* **9**, 16 (1960).
- [Karlik, 2002] M. Karlik, rapport de Czech Technical University in Prague V-KMAT-516/02 (2002).
- [Keh 1964] A. S. Keh, *Phil. Mag. Ser.* **8, 12**, 9 (1964).
- [Keh 1964] A. S. Keh, *Phil. Mag. Ser.* **8, 12**, 9 (1964).
- [Keh et Nakada 1968] A.S. Keh and Y. Nakada, *Trans. JIM*, **9**, 876 (1968).
- [Kocks et Mecking 2003] U.F. Kocks, H. Mecking, *Prog. Mat. Sci.* **48**, 171 (2003).
- [Kubin *et al.* 2003] L.P. Kubin, R. Madec, B. Devincere "Multiscale Phenomena in Materials- Experiments and Modeling Related to Mechanical Behavior", H. Zbib *et al.* (Eds.), *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.* **779**, W1.6 (2003).
- [Lavrentev 1980] F. F. Lavrentev, *Mat. Sci. Eng.* **46**, 191 (1980).
- [Madec 2001] R. Madec, Thèse de doctorat de l'Université de Paris XI (2001)
- [Madec 2007] R. Madec, communication privée.
- [Madec *et al.* 2002] R. Madec, B. Devincere, L.P. Kubin, *Phys. Rev. Letter* **89**, 255508-1 (2002).
- [Madec *et al.* 2003] R. Madec, B. Devincere, L.P. Kubin, T. Hoc, D. Rodney, *Science* **301**, 1879 (2003).
- [Madec et Kubin 2004a] R. Madec, L.P. Kubin, *Solid Mech. Appl.* **115**, 69 (2004).
- [Madec et Kubin 2004b] R. Madec and L. P. Kubin CIMTEC proceedings, 671 (2004).
- [Madec et Kubin 2005] R. Madec et L. Kubin, éditeurs P. Vincenzini et A. Lami, 3rd international Conference Computational Modeling and Simulation of Materials part A, 671, Techna Group Srl, (2005).
- [Mecking et Kocks 1981] H. Mecking, U. F. Kocks, *Acta Metall.* **29**, 1875 (1981).
- [Monnet *et al.* 2004] G. Monnet, B. Devincere, L. Kubin, *Acta Mater.* **52**, 4317 (2004).
- [Monnet et Devincere 2005] G. Monnet, B. Devincere, *Phil. Mag.* **86**, 1555 (2006).
- [Olivares et Sevillano 1987] F. H. Olivares et J. G. Sevillano, *Acta Metall.* **35**, 631 (1987).
- [Perrera da Costa 2004] C. Perrera da Costa, Rapport de stage de l'Institut National Polytechnique de Grenoble (2004).
- [Politano et Salazar 2000] O. Politano, J. M. Salazar, *Comp. Mat. Sci.* **17**, 343 (2000).
- [Prinz et Argon 1984] F. B. Prinz, A. S. Argon, *Acta Metall.* **32**, 1021 (1984).
- [Rauch 1993] E. Rauch, HDR de l'Institut National Polytechnique de Grenoble (1993).
- [Rodney et Phillips 1999] D. Rodney, R. Phillips, *Phys Rev. Letters* **82**, 1704 (1999).
- [Saada 1960] G. Saada, *Acta Metall.* **8**, 841 (1960).
- [Schoeck et Frydman 1972] G. Schoeck and R. Frydman, *Phys. Stat. Sol.* **53**, 661 (1972).
- [Sevillano 1993] J. G. Sevillano, editeur H. Mughrabi, *Plastic deformation and fracture of*

- materials, 19 (1993).
- [Shenoy *et al.* 2000] V.B. Shenoy, R.V. Kukta and Phillips R., Phys. Rev. Lett. **84**, 1491 (2000).
- [Stainier *et al.* 2002] L. Stainier, A.M. Cuitiño, M. Ortiz, J. Mech. Phys. Solids **50**, 1511 (2002).
- [Tabourot *et al.* 1997] L. Tabourot, M. Fivel and E. Rauch Mat. Sci. Eng. A 234, 639 (1997).
- [Takeuchi et Mano 1972] T. Takeuchi and J. Mano, Acta Metall. 20, 809 (1972).
- [Teodosiu *et al.* 1993] C. Teodosiu, J.L. Raphanel, L. Tabourot, in : Large Plastic Deformations. Eds. C. Teodosiu, J.L. Raphanel, F. Sidoroff. (A.A. Balkema, Rotterdam), 153 (1993).
- [Urabe et Weerman 1975] N. Urabe, J. Weerman, Mat. Sci. Eng. 18, 41 (1975).
- [Viatkina *et al.* 2005] E. M. Viatkina, W. A. M. Brekelmans, M. G. D. Geers, J. Mat. Proc. Tech. **168**, 211 (2005).
- [Wickham *et al.* 1999] L.K. Wickham, K.W. Schwarz and J.S. Stolken, Phys. Rev. Lett. **83**, 4574 (1999).
- [Zhou *et al.* 1998] S. J. Zhou, D. L. Preston, P. S. Lomdahl. D. M. Beazley, Science **279**, 1525 (1998).

---

## CHAPITRE IV. DURCISSEMENT STRUCTURAL

---

---

<b>Introduction</b>	<b>103</b>
<b>IV.1. Durcissement associé aux carbures</b>	<b>104</b>
IV.1.1. Les carbures dans les aciers de cuve	104
IV.1.2. Durcissement induit par une rangée périodique infinie de particules	106
IV.1.3. Durcissement induit par une distribution aléatoire de carbures	113
<b>IV.2. Composition des durcissements par précipitation et de la forêt</b>	<b>121</b>
IV.2.1. Revue des différents travaux de superposition de mécanismes	121
IV.2.2. Simulations avec forêt et carbures	125
<b>IV.3. Discussion du rôle des barrières microstructurales de la bainite</b>	<b>133</b>
<b>Bibliographie</b>	<b>136</b>

---

### Introduction

Ce chapitre est consacré principalement au durcissement par précipitation dans les aciers de cuve ou plus précisément le durcissement associé aux carbures intralattes. De tels précipités constituent potentiellement des obstacles considérables aux mouvements des dislocations, de par leurs densités, la nature de l'interaction avec les dislocations, et leur caractère tridimensionnel. Les modèles actuels ne permettent pas toujours de prédire un tel durcissement, justifiant ainsi les études récentes faites par DD.

Pour débiter et en se basant sur les observations expérimentales du premier chapitre, nous allons définir les ingrédients et paramètres importants pour le traitement des carbures à une échelle mésoscopique. Puis, le problème du durcissement par précipitation sera réduit à sa plus simple expression, c'est-à-dire en simulant l'interaction d'une dislocation infinie avec une rangée périodique de particules. Nous verrons ainsi que la DD reproduit parfaitement l'influence des interactions dipolaires prédite par Bacon *et al.* [Bacon *et al.* 1972]. Nous

déterminerons ensuite le durcissement induit par une distribution aléatoire de carbures représentative en densité et en taille des aciers de cuve. Les résultats de la DD seront comparés aux modèles analytiques de la littérature. Nous verrons ainsi que la contribution à la contrainte d'écoulement associée aux carbures est comparable à celle de la forêt. Un mécanisme de durcissement ne peut être négligé devant le second. L'étude de leur composition est ainsi rendue nécessaire. Il s'agit d'un travail original, puisque la composition de ces deux mécanismes en particulier n'a jamais été discutée. Une revue bibliographique sera proposée au sujet de la question générale de la composition de mécanismes. Les résultats obtenus par la DD seront comparés aux lois de composition de la littérature. Pour terminer, nous discuterons succinctement le rôle des barrières microstructurales qui existent entre les lattes de ferrite.

## **IV.1. Durcissement associé aux carbures**

### **IV.1.1. Les carbures dans les aciers de cuve**

Nous aborderons dans cette première partie trois aspects qui sont autant de paramètres d'entrée des simulations de DD : quantifier la densité des précipités, leur distribution en taille et enfin la nature de leur interaction avec les dislocations.

#### **Interaction avec les dislocations**

Les observations expérimentales présentées au premier chapitre ont montré que les particules intra-lattes sont des carbures et essentiellement de la cémentite [Carassou 2000]. Leur structure cristalline est incohérente avec celle de la matrice de ferrite, ce qui les rend impénétrables. Les dislocations n'ont d'autre solution que de les contourner selon le mécanisme d'Orowan. Elles laissent après leur passage une boucle d'Orowan qui encercle les carbures. Les caractérisations menées au MEB et au MET ont montré que les carbures intra-lattes sont généralement sphériques [Carassou 2000, Hausild 2002]. C'est pourquoi, les carbures seront introduits dans nos simulations sous forme de sphères, impénétrables pour les dislocations. Il faut noter que ce travail est l'une des premières études assurant un traitement à trois dimensions des précipités. Il n'existe en effet dans la littérature que deux autres études comparables. D'une part, Shin *et al.* [Shin *et al.* 2005] ont étudié la fatigue dans les alliages durcis par précipitation. Les précipités sont introduits sous forme de sphères, à l'image de ce qui est fait ici. D'autre part, Monnet [Monnet 2006a] a étudié le durcissement par précipitation dans les alliages de zirconium. Ses simulations mettent en jeu une microstructure de dislocations tridimensionnelle et une distribution de deux familles de précipités. Ces derniers sont introduits sous forme de disques impénétrables dans le plan de glissement.

La présence de précipités durs induit une distorsion de la matrice, à cause de la différence de

module élastique qui existe entre les deux phases. Ceci donne naissance à une force d'interaction entre les particules et les dislocations. Il existe dans la littérature un certain nombre de discussions sur ce sujet en relation avec le problème de l'inclusion d'Eshelby (*cf.* les revues de [Nembach 1996, Brown et Ham 1971]). Brown et Ham [Brown et Ham 1971] suggèrent que de tels effets affectent peu le mécanisme d'Orowan et peut être pris en compte au travers d'un diamètre effectif des précipités. Shin *et al.* [Shin *et al.* 2003] ont confirmé récemment les calculs de Brown et Ham [Brown et Ham 1971]. En ce sens, ils ont défini dans un premier temps la force d'interaction entre une particule et une dislocation vis à l'aide d'une simulation par éléments finis. Cette force est ensuite introduite dans des simulations de DD portant sur l'interaction entre une dislocation vis et deux carbures. Leurs résultats démontrent que la contrainte critique de franchissement des précipités n'est que faiblement augmentée (moins de 6 %) même pour une différence de module importante (un rapport de six entre les modules de la particule et de la matrice). C'est pourquoi dans le cadre de ce travail, il a été décidé de ne pas prendre en compte de champ élastique associé aux précipités. Ces derniers sont traités seulement comme des obstacles géométriques. Ceci est également le choix adopté dans les études de DD les plus récentes du mécanisme d'Orowan [Mohles 2001a, Monnet 2006a].

### Densité et tailles des carbures

Il existe relativement peu d'informations concernant les carbures des aciers de cuve (*cf.* chapitre I). Les rares caractérisations à des échelles fines sont peu satisfaisantes. Ortner *et al.* [Ortner *et al.* 2003] ont déterminé les densités et distribution de tailles des carbures dans l'acier 16MND5 à l'aide d'observations menées au MET. Mais ces auteurs s'intéressent principalement aux carbures présents dans les amas et non pas ceux au sein des lattes. Ils estiment ensuite une densité volumique globale des carbures par une interpolation linéaire de la fraction surfacique que représentent les amas en comparaison avec la microstructure globale des aciers. Ortner *et al.* obtiennent de cette manière une densité volumique  $N_v$  de  $7,6 \pm 2,4 \cdot 10^{17} \text{ m}^{-3}$ . La distance moyenne  $\bar{L}_p$  entre particules peut être simplement estimée à l'aide de l'équation IV.1 :

$$\bar{L}_p = 1/\sqrt{\bar{D}N_v} \quad \text{Équation IV.1}$$

Elle fait apparaître  $\bar{D}$  le diamètre moyen des particules qui est ici de  $0,1 \text{ }\mu\text{m}$  [Hausild 2002, Carassou 2000]. A la densité estimée par Ortner, correspond une distance moyenne de l'ordre de  $3,6 \text{ }\mu\text{m}$ . Cette valeur est très nettement supérieure à celle généralement observée dans les lattes. Les carbures sont plutôt séparés d'une distance inférieure au micron, comme le révèle la Figure I.1.6. Les caractérisations des carbures menées sur d'autres nuances utilisées pour la fabrication de cuves de REP n'apportent pas beaucoup plus d'informations. Par exemple, Lee *et al.* [Lee *et al.* 2002] ont défini la distribution de taille des carbures dans un acier SA 508 considérant sa

microstructure dans sa globalité (à la fois les carbures intra-lattes et ceux dans les amas). La distribution de taille obtenue est au final assez proche de celle obtenue par Ortner, présentant un diamètre moyen de 0,1  $\mu\text{m}$ . Par contre, ces auteurs ne donnent aucune valeur concernant la densité des carbures.

Considérant ce manque d'informations, la seule solution qui s'offrait à nous au début de ce travail était donc de refaire des mesures. En ce sens, des observations au MEB ont été réalisées au sein d'eDF [Monnet 2006b]. Cette technique autorise une surface d'observation bien plus conséquente en comparaison de ce que permettent les observations au MET. L'estimation de la densité surfacique qui en découlera peut être jugée comme fiable. Par contre, la résolution de ces clichés n'est pas suffisante pour définir une distribution précise des tailles des précipités. Mais ceci est un moindre mal, car nous le verrons par la suite, la distance moyenne entre précipités est le paramètre déterminant pour le durcissement par précipitation de ces aciers. On pourra alors se contenter d'un diamètre moyen de carbures. Trois micrographies MEB ont été retenues. Les densités surfaciques  $N_s$ , concernant les seuls carbures intra-lattes, sont estimées respectivement de 1,9, 2,6 et 4,5  $10^{13} \text{ m}^{-2}$ . Le diamètre moyen est quant à lui estimé de l'ordre de 0,1  $\mu\text{m}$ , ce qui est par ailleurs la valeur généralement observée [Carassou 2000, Hausild 2002]. Il est possible d'estimer la densité volumique  $N_v$  à l'aide de l'équation IV.2 (cf. [Nembach 1996]):

$$N_v \approx N_s / \bar{D} \quad \text{Équation IV.2}$$

Les densités volumiques pour les trois micrographies réalisées sont donc respectivement 1,9, 2,6 et 4,5  $10^{19} \text{ m}^{-3}$ . Il faut noter que les trois clichés conduisent à des valeurs relativement proches. Les mesures sont au plus séparées d'un facteur deux. La densité moyenne correspondant à ces trois micrographies est de 3  $10^{19} \text{ m}^{-3}$ . La distance moyenne associée à cette nouvelle densité est de l'ordre de 0,6  $\mu\text{m}$ . Cette valeur est en meilleur accord avec les observations faites au MET (cf. Figure I.1.6) [Hausild 2002, Carassou 2000]. Cette densité de 3  $10^{19} \text{ m}^{-3}$  est donc bien représentative des carbures intra-lattes. Elle sera la valeur considérée par la suite dans nos simulations. Ne disposant pas d'information précise sur la distribution des tailles des carbures intra-lattes, ces derniers seront supposés présenter une taille unique de 0,1  $\mu\text{m}$ .

#### **IV.1.2. Durcissement induit par une rangée périodique infinie de particules**

Le durcissement par précipitation est un problème complexe, qui fait intervenir une multitude de paramètres. Paramètres qui sont associés soit directement aux propriétés des précipités, soit à leur distribution ou encore à leur interaction avec les dislocations. Parmi tout ceci, ce travail se limite au durcissement induit par des précipités non-cisillables. Afin de s'affranchir des effets associés de distribution, nous allons pour débiter, étudier le durcissement associé à une rangée périodique de précipités. De telles configurations ont été étudiées par



Bacon *et al.* [Bacon *et al.* 1973], et leur ont permis de mettre en évidence l'effet des « interactions dipolaires ». De manière plus précise, les interactions dipolaires entre les parties de dislocations qui entourent le précipité affectent de manière significative à la fois la contrainte critique  $\tau_c$  et la forme adoptée par la dislocation. Cet effet avait été depuis longtemps supposé (*cf.* [Foreman et Making 1964, Brown et Ham 1971]). La contrainte critique peut alors être assez éloignée de la contrainte théorique d'Orowan  $\tau_{Orowan} = \mu b/L_p$  qui est basée sur une tension de ligne fixe, et ne prend en compte que  $L_p$  la distance entre particules. Les calculs réalisés par Bacon *et al.* portent sur une dislocation infinie, de caractère coin ou vis. A chaque incrément de contrainte appliquée, la dislocation est relaxée jusqu'à sa forme d'équilibre. La contrainte critique est associée à la dernière position d'équilibre obtenue. Leurs résultats conduisent Bacon *et al.* à exprimer la contrainte critique pour contourner les particules sous la forme :

$$\tau_c = A \frac{\mu b}{L_p} \left[ \ln \left( \frac{\bar{D}}{r_0} \right) + B \right] \quad \text{Équation IV.3}$$

Le coefficient  $A$  dépend du caractère initial de la dislocation. Il vaut  $1/2\pi$  pour une dislocation coin, et  $1/2\pi(1-\nu)$  pour une vis. Le coefficient  $B$  est pris égal à 0,7, et demeure petit devant le terme logarithmique. S'inspirant de la notion de diamètre harmonique, Bacon *et al.* définissent  $\bar{D}$  comme  $(D^{-1} + L_p^{-1})^{-1}$ . L'introduction de  $\bar{D}$  dans le terme logarithmique permet de traduire l'existence de deux configurations limites à ce problème. D'une part, lorsque  $L_p$  est petite comparée à  $D$ , La dislocation se comporte comme une dislocation isolée, qui interagit peu avec les sections présentes du coté opposé des précipités, alors  $\bar{D} \approx L_p$ . A l'inverse, lorsque  $D$  est petit en comparaison à  $L_p$ , les parties de dislocation de part et d'autre de la particule interagissent fortement l'une avec l'autre.  $\bar{D}$  tend alors vers  $D$ . Pour la majeure partie des valeurs de  $\bar{D}$ , la relation de Bacon donne une contrainte très différente de celle d'Orowan. La seule exception est obtenue pour un diamètre harmonique  $\bar{D}$  proche de  $200 b$  pour une dislocation coin et de  $30 b$  pour une vis.

Dans ce qui suit, des simulations similaires vont être présentées pour confirmer les résultats obtenus par Bacon *et al.* [Bacon *et al.* 1973]. Il faut noter que Shin *et al.* [Shin *et al.* 2003] ont récemment poursuivi le même but. Cependant leurs simulations sont, en toute rigueur, différentes de celles de Bacon *et al.* Elles portent sur une dislocation ancrée qui interagit avec deux particules. Les parties de dislocation situées entre une particule et un point d'ancrage se courbent bien moins que celles entre les deux particules. La symétrie est cassée de part et d'autre des particules, et les interactions dipolaires sont certainement affaiblies. Il est surprenant que leurs résultats soient en accord avec ceux de Bacon *et al.* Mais ces auteurs n'explorent pas

un domaine très étendu en terme de diamètre harmonique. Un facteur deux sépare les diamètres extrêmes.

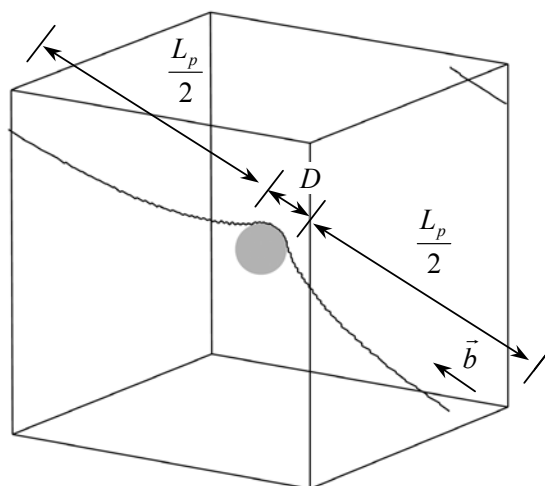


Figure IV.1. Simulation de l'interaction entre une dislocation infinie de caractère initial vis avec des particules. La cellule élémentaire du milieu périodique simulé est reproduite. Dans cet exemple, le diamètre des particules est de  $0,1 \mu\text{m}$  (environ  $400 b$ ) et elles sont séparées de  $0,48 \mu\text{m}$  (environ  $1900 b$ ), ce qui correspond aux caractéristiques moyennes des carbures des aciers de cuve.

Tableau IV.1. Synthèse des contraintes critiques obtenues pour les différents diamètres et longueurs explorés. La valeur de la contrainte d'Orowan est rappelée.

	$D (b)$	$L (b)$	$\bar{D} (b)$	$\tau_c$ (MPa)	$\tau_{Orowan}$ (MPa)
Vis	10	1000	10	65,6	83,6
	31	1000	30	92,0	83,6
	31	10000	31	8,8	8,4
	100	1000	91	104,3	83,6
	100	10000	99	9,7	8,4
	500	1000	333	133,0	83,6
	500	10000	476	12,5	8,4
	1000	10000	909	14,5	8,4
	403	1923	333	68,9	43,5
Coin	10	1000	10	37,6	83,6
	100	1000	91	73,1	83,6
	1000	10000	909	9,7	8,4

Dans ce travail, une dislocation sans point d'ancrage est introduite dans une boîte de simulation avec des Conditions aux Limites Périodiques (CLP). La forme de la boîte est choisie

de manière à ce que la dislocation vis ou coin passe par la diagonale au trois côtés. Par le jeu des CLP, la dislocation est ainsi assimilable à une dislocation infinie. Elle interagit avec une particule impénétrable introduite au centre de la boîte de simulation (*cf.* figure IV.1). Le plan de glissement de la dislocation coupe le centre de la particule. Dans notre travail, les valeurs de diamètres  $D$  et distances  $L_p$  sont repris des travaux de Bacon *et al.* Concernant les dislocations initialement vis, le diamètre des particules est pris égal à 10, 31, 100, 310 et 1000  $b$ , et pour chacun de ses diamètres deux distances  $L_p$  sont étudiées : 1000 et 10000  $b$ . Au sujet des dislocations coin, trois couples diamètre-distance sont considérés 10, 100 et 1000  $b$  en diamètre et respectivement 1000, 1000 et 10000  $b$  en longueur. L'utilisation des CLP rend nécessaire une vérification préalable. Il est important que la dislocation simulée n'interagisse pas fortement avec ses images. Pour tester ce point, la taille de la boîte simulée peut être multipliée par 2 ou 3, la distance entre particules demeurant fixe. On introduit ainsi 1, 2 ou 3 particules dans le volume simulé tout en réduisant la densité de dislocations. Comme ces différentes configurations ne modifient pas les résultats simulés, on montre que la solution simple d'une seule particule par boîte de simulation est satisfaisante (*cf.* figure IV.1). Le choix de la longueur de discrétisation  $\lambda$  doit aussi être justifié. En l'occurrence il est important ici de bien décrire la courbure autour du précipité. Nous avons choisi la longueur de discrétisation  $\lambda$  de manière à ce que la dislocation autour du précipité soit décrite par une vingtaine de segments. La vitesse de déformation imposée est choisie afin que la déformation reste quasi-statique.

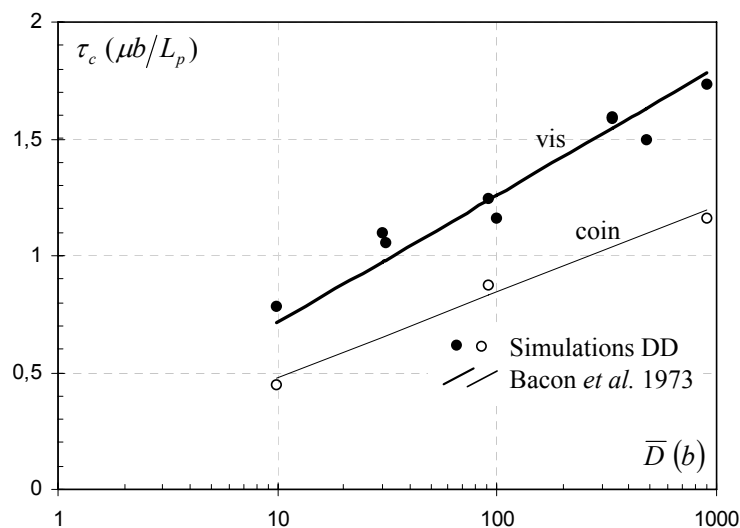


Figure IV.2. Contrainte critique pour contourner une rangée de particules impénétrables en fonction du diamètre harmonique  $\bar{D}$  et du caractère initial de la dislocation infinie. Les résultats des simulations sont comparés à la relation proposée par Bacon *et al.* [Bacon *et al.* 1973].

Les figures IV.1 et IV.2 regroupent les résultats obtenus en comparaison avec le modèle de

Bacon *et al.* Il ressort clairement que les valeurs des contraintes critiques issues des simulations sont en bon accord avec la prédiction du modèle de Bacon *et al.* et ceci sur deux ordres de grandeur. La dépendance en fonction du caractère est bien reproduite ainsi que l'importance du terme logarithmique faisant intervenir le diamètre harmonique. La dislocation est plus courbée entre les précipités les plus gros, pour lesquels la contrainte dépasse celle d'Orowan ( $D > 30 b$  pour une vis et  $D > 120 b$  pour une coin). La densité et le diamètre moyen représentatifs des carbures des aciers de cuve correspondent à un diamètre harmonique de  $333 b$ . Il est intéressant de remarquer que ce diamètre correspond à une contrainte critique supérieure à celle d'Orowan (44 MPa), en particulier pour des dislocations vis (69 MPa). Ce résultat sera discuté par la suite.

### Ecrouisseage induit par l'accumulation de boucles d'Orowan

Ce type de simulations est l'occasion d'étudier l'écrouisseage induit par l'accumulation de boucles d'Orowan autour des particules. Rappelons que celles-ci sont répulsives vis à vis des dislocations suivantes, et rendent de plus en plus difficile le déplacement des dislocations. En pratique, la dislocation simulée après avoir contourné les particules est réintroduite grâce aux CLP dans le même plan de glissement, et interagit à nouveau avec les particules. Les simulations portent sur des précipités ayant les caractéristiques dimensionnelles représentatives des aciers de cuve ( $D = 0,1 \mu\text{m}$  et  $L = 0,48 \mu\text{m}$ ).

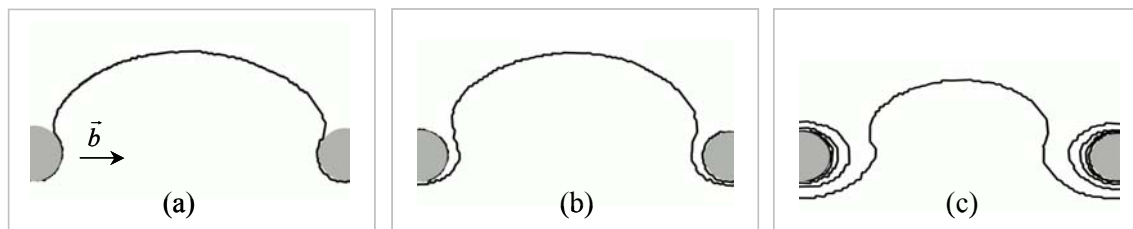


Figure IV.3. Formes critiques d'une dislocation initialement vis contournant par le mécanisme d'Orowan des particules (a) seules, (b) encerclées d'une boucle d'Orowan et (c) encerclées de quatre boucles d'Orowan.

La figure IV.3 présente les différentes formes critiques prises par une dislocation initialement vis, franchissant des particules encerclées par des boucles d'Orowan. Hormis la première qui est accolée aux précipités, les boucles suivantes qui s'accumulent, adoptent une forme allongée suivant l'orientation du vecteur de Burgers pour minimiser l'énergie des boucles. Le champ de contraintes induit par les boucles d'Orowan réduit d'une part la distance entre particules « vue » par la dislocation suivante. Et d'autre part, augmente la distance que doivent parcourir les dislocations avant de s'annihiler pour former une nouvelle boucle d'Orowan. Ces remarques laissent entrevoir un écrouisseage très fort, ce qui est confirmé par la figure IV.4 qui représente l'évolution de la contrainte d'écoulement.

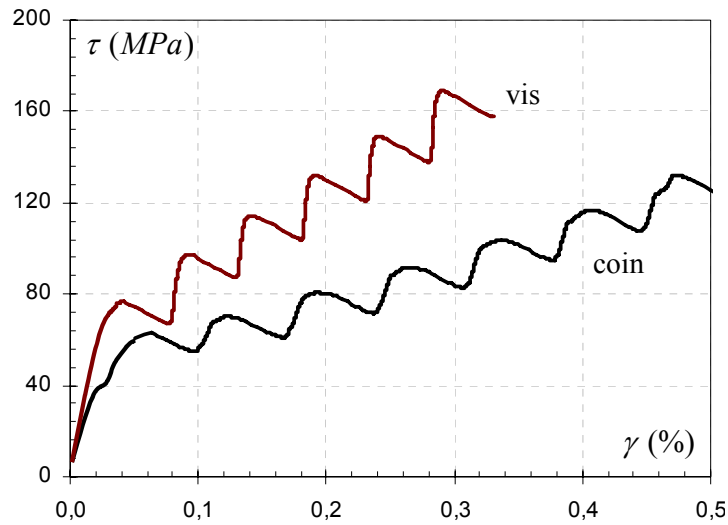


Figure IV.4. Contrainte d'écoulement en fonction du cisaillement lors de l'accumulation de boucles d'Orowan autour d'une rangée infinie et périodique de particules. La friction d'alliage utilisée ici est de 5 MPa.

A chaque maximum local de la courbe contrainte-déformation correspond un contournement de la rangée de particules et donc la formation de nouvelles boucles d'Orowan. Entre chaque événement de contournement, la contrainte diminue relativement peu. La dislocation, une fois libérée des particules, n'est retenue par aucun obstacle et le niveau de contrainte est suffisamment élevé pour qu'elle vienne au contact de la rangée suivante en quelques itérations seulement. Quel que soit le caractère initial de la dislocation infinie, l'écroutissage observé est fort. La contrainte critique augmente linéairement avec le nombre de boucles accumulées. Cette linéarité a déjà été observée dans d'autres travaux, comme les calculs analytiques de Fischer [Fisher *et al.* 1953], ou les simulations de DD réalisées par Shin *et al.* [Shin *et al.* 2003].

Par interpolation, l'augmentation de la contrainte critique de franchissement en fonction du nombre,  $n$ , de boucles d'Orowan s'écrit  $\tau_c = (1 + 0,3n)\tau_{c0}$  avec  $\tau_{c0}$  la contrainte critique sans boucle autour des précipités. Elle vaut  $\tau_c = (1 + 0,25n)\tau_{c0}$  pour une dislocation vis. La différence d'écroutissage entre les caractères vis et coin est significative, de l'ordre de 20 %.

Fischer *et al.* [Fisher *et al.* 1953] ont proposé un modèle en tension de ligne pour prédire l'écroutissage induit par l'accumulation de boucles. Mais leur relation fait intervenir un coefficient empirique traduisant la position relative entre les sources de dislocations et les particules. Shin *et al.* [Shin *et al.* 2003] ont repris ce modèle en ajustant le paramètre empirique à partir des résultats sur plusieurs couples diamètre-distance entre particules. Dans le cadre de ce travail, nous allons proposer un modèle simplifié. Comme le suggère la figure IV.3, la variation des formes critiques pour passer des particules avec un nombre croissant de boucles d'Orowan, rappelle l'influence que peut avoir le diamètre des particules. L'écroutissage associé

à l'accumulation de boucles est dû à l'agrandissement d'un diamètre « effectif »  $D_{eff}$  des particules. On suppose ainsi que la contrainte d'écoulement suit toujours la relation proposée par Bacon *et al.* (cf. équation IV.3) et devient :

$$\tau_c = A \frac{\mu b}{L_0 - D_{eff}} \left[ \ln \left( \frac{\bar{D}}{r_0} \right) + B \right] \quad \text{Équation IV.4}$$

Cette relation fait désormais intervenir la distance entre les centres des particules  $L_0$ , qui est différente de la distance entre les bords des particules  $L_p$ , utilisée jusqu'à présent. Le diamètre harmonique  $\bar{D}$  pour sa part devient :

$$\bar{D} = \left[ D_{eff}^{-1} + (L_0 - D_{eff})^{-1} \right]^{-1} \quad \text{Équation IV.5}$$

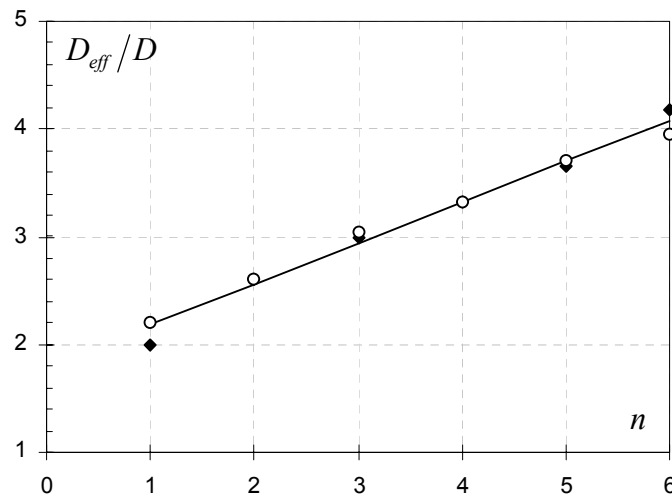


Figure IV.5. Rapport entre le diamètre effectif et le diamètre des particules en fonction du nombre  $n$  de boucles d'Orowan entourant les précipités. Les losanges pleins se rapportent à une dislocation de caractère initial vis et les marques vides à une dislocation coin. La droite est la régression approchant les valeurs à la fois des vis et des coins.

Il est possible de calculer le diamètre effectif correspondant à  $n$  boucles d'Orowan, en assurant l'égalité de l'équation IV.4 avec la contrainte issue des simulations DD. Les solutions sont obtenues par résolution numérique et sont données en figure IV.5. Le diamètre effectif évolue de manière quasi-linéaire avec le nombre de boucles d'Orowan encerclant les particules. Ceci est surprenant si l'on croise l'équation IV.4 et la variation linéaire de la contrainte d'écoulement avec  $n$ . Mais il est vrai que le diamètre effectif n'évolue pas sur un domaine suffisamment étendu pour discuter de sa variation réelle. La pente reste identique quel que soit le caractère initial vis ou coin des dislocations. Ceci suggère que le contournement de particules encerclées met en jeu l'interaction avec la totalité des boucles. Il est intéressant de noter

l'évolution brutale du diamètre effectif lors de la formation de la première boucle. Il correspond au double du diamètre de la particule après la première boucle d'Orowan et évolue plus lentement ensuite. Afin de disposer d'un modèle prédictif pour l'écroissage du à un empilement de boucles d'Orowan, l'évolution du diamètre effectif est admise comme une fonction linéaire du nombre de boucles et est supposée ne pas varier en fonction du caractère initial de la dislocation. Une régression linéaire définit ainsi le diamètre effectif comme  $D_{eff} = (1,8 + 0,4n)D$ . Elle est reportée dans la figure IV.5.

Il faut retenir de ces mesures deux points qui seront utiles pour des discussions ultérieures : (i) nos simulations ont permis de retrouver l'influence importante des interactions dipolaires sur le mécanisme d'Orowan, (ii) l'écroissage induit par l'accumulation de boucles autour des carbures est très important.

#### IV.1.3. Durcissement induit par une distribution aléatoire de carbures

Le durcissement associé à une distribution aléatoire de précipités a fait l'objet de nombreux travaux, tant sur le plan analytique que par simulations. Des revues peuvent être trouvées à ce sujet dans [Brown et Ham 1971, Kocks 1977, Nembach 1996]. Toutefois, les simulations de DD ont montré que les modèles de la littérature ne parviennent pas toujours à prédire le durcissement par précipitation. Les principaux travaux réalisés à ce sujet sont rapidement résumés.

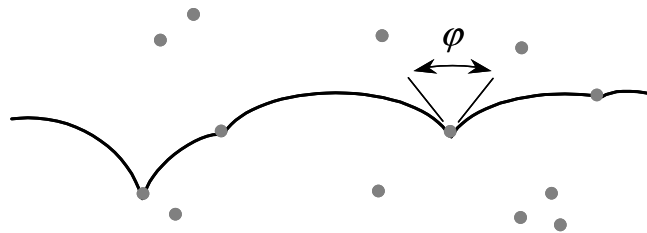


Figure IV.6. Définition de l'angle critique  $\varphi_c$  que doit adopter une dislocation autour d'un obstacle pour le passer.

Les premiers travaux, réalisés à peu près au même moment par Kocks [Kocks 1967] ainsi que Foreman et Makin [Foreman et Makin 1966] ont porté sur l'interaction d'une dislocation avec une distribution aléatoire d'obstacles ponctuels infranchissables. Ces deux travaux conduisent à des résultats similaires. La contrainte d'écoulement prend la forme  $\tau_p = \mu b / L_{eff}$ , dans laquelle  $L_{eff}$  est la distance effective séparant les obstacles. Elle est bien supérieure à la distance moyenne  $L_p$ , estimée selon l'hypothèse d'un réseau carré, qui intervient dans la contrainte d'Orowan. La méthode proposée par Foreman et Makin suppose que les

dislocations sont courbées sous forme d'arcs de cercle entre deux obstacles. Le rayon est calculé à partir de la contrainte appliquée. Foreman et Makin font appel à la notion d'angle critique qui est l'angle  $\varphi_c$  que doit adopter la dislocation autour de l'obstacle pour le passer (*cf.* figure IV.6). Il définit en quelque sorte la force pour passer un obstacle. Plus l'angle est petit, plus la dislocation doit se courber pour passer l'obstacle, plus ce dernier est considéré comme fort. Le mécanisme d'Orowan constitue le cas limite pour lequel  $\varphi_c$  vaut zéro.

Dans les simulations de Foreman et Makin, les dislocations se détachent d'un obstacle à partir du moment où l'angle qu'elles forment autour de lui est plus petit que l'angle critique. Ces auteurs obtiennent de cette manière une distance effective  $L_{eff}$  valant  $L_p/0,81$ . Kocks quant à lui obtient à l'aide de sa théorie statistique une distance  $L_{eff}$  assez similaire de  $L_p/0,84$ . Comme l'avaient discuté Foreman et Makin, ces approches font appel à deux hypothèses très fortes qui limitent leur aspect prédictif. La tension de ligne utilisée est fixe et les interactions dipolaires qui ont lieu autour des particules ne sont pas prises en compte.

Il faudra attendre l'analyse faite par Hirsch et Humphrey [Hirsch et Humphrey 1969] pour que se profile une des premières formulations rendant compte des interactions dipolaires. La contrainte associée au mécanisme d'Orowan est ainsi liée à la contrainte nécessaire à l'allongement des dipôles qui se forment de part et d'autre des particules :

$$\tau_p = \frac{0,8 \mu b \ln(D/b)}{2\pi L (1-\nu)^{1/2}} \quad \text{Équation IV.6}$$

On retrouve dans cette expression le facteur 0,8 obtenu par Kocks et Foreman et Making pour traduire l'effet de la dispersion sur la distance moyenne entre particules. Le diamètre des particules apparaît dans le terme logarithmique. Hirsch et Humphrey introduisent également le terme  $(1-\nu)^{1/2}$  pour moyenniser la différence d'énergie de ligne entre les caractères vis et coin.

Comme nous l'avons vu dans la partie IV.1.2, Bacon *et al.* [Bacon *et al.* 1973] ont étudié en détail l'influence des interactions dipolaires sur la contrainte critique pour passer des obstacles de taille finie. Ils montrent ainsi que ces interactions abaissent significativement la contrainte critique (en comparaison à  $\tau_{Orowan}$ ), lorsque le diamètre harmonique est petit. La forme critique est elle-aussi très influencée, s'écartant beaucoup d'un arc de cercle. A partir de ces observations, Bacon *et al.* ont également proposé un modèle tenant compte à la fois des effets dipolaires et la dispersion aléatoire d'une distribution de particules. Puisque les interactions dipolaires aident au passage des particules, ils supposent que le contournement par Orowan d'obstacles de taille finie est équivalent à passer des obstacles ponctuels de force bien moindre. Autrement dit, l'angle  $\varphi_c$  pour passer un obstacle ponctuel impénétrable est supérieur à zéro grâce aux interactions dipolaires. Bacon *et al.* proposent ainsi d'exprimer la contrainte d'écoulement suivant l'équation IV.6 :



$$\tau_p = \left( \frac{\ln(\bar{D}/b) + 0,7}{\ln(L/b)} \right)^{3/2} \frac{\mu b \ln(L/b)}{L \cdot 2\pi} \quad \text{Équation IV.7}$$

Il faut noter enfin que ce modèle s'appuie sur l'approximation de Friedel au sujet de la contrainte d'écoulement dans une distribution d'obstacle faible [Friedel 1964].

Les simulations DD portant sur le durcissement par précipitation sont encore peu nombreuses [Mohles 2003, Mohles 2004, Yashiro *et al.* 2006] et leur nombre se restreint encore pour ce qui concerne le mécanisme d'Orowan qui nous intéresse en particulier [Mohles 2001a, Mohles 2001b, Shin *et al.* 2005, Monnet 2006a]. Mohles a notamment introduit une distribution de taille très réaliste et facilement comparable à des caractérisations expérimentales [Mohles 2001a, Mohles 2001b]. Il s'agit néanmoins de simulations à deux dimensions qui ne portent que sur une seule dislocation. Mohles constate que la contrainte d'écoulement diffère suivant le caractère initial vis ou coin de la dislocation. Alors que Monnet [Monnet 2006a] obtient un durcissement indépendant du caractère initial dans le cas de sources. Une des conclusions principales de ce dernier travail est que la contrainte simulée est nettement surestimée par les modèles analytiques, exception faite de la formulation proposée par Bacon *et al.* (*cf.* équation IV.6) qui donne une prédiction proche des simulations.

### Microstructure de dislocations et courbes de déformation

Dans ce qui suit, le durcissement induit par les carbures des aciers de cuve est étudié. Pour cela, une distribution aléatoire de carbures est introduite, d'une densité de  $3 \cdot 10^{19} \text{ m}^{-3}$  et d'un diamètre fixe de  $0,1 \text{ }\mu\text{m}$ . A cette densité correspond une distance moyenne entre le centre des carbures de  $0,58 \text{ }\mu\text{m}$ . Cette distance constitue en quelque sorte la dimension caractéristique du problème. La boîte de simulations est prise égale à  $2 \text{ }\mu\text{m}$  de côté et contient environ 300 carbures. La microstructure initiale de dislocations est constituée de 10 sources appartenant à un unique système (nommé par la suite primaire) d'une longueur de  $2 \text{ }\mu\text{m}$  et de caractère initial aléatoire. La densité initiale de dislocations est de  $10^{13} \text{ m}^{-2}$ . La longueur de discrétisation suit la même exigence que celle discutée en partie IV.2. Enfin, la déformation au cours de la simulation est assurée à vitesse imposée. Pour rappel, les propriétés des dislocations ainsi que le traitement des particules dans ce travail sont insensibles à la vitesse de déformation. La valeur de la vitesse de déformation de  $2000 \text{ s}^{-1}$  est reprise des simulations réalisées au chapitre précédent. Une friction d'alliage de  $30 \text{ MPa}$  est aussi reprise.

Les travaux pionniers [Foreman et Makin 1966] ou les simulations de DD plus récentes [Mohles 2001a, Monnet 2006a] ont mis en évidence le comportement particulier des dislocations lors du passage au travers d'obstacles impénétrables. Elles pénètrent en profondeur des régions « molles », dans lesquelles les particules sont plus distantes les unes des autres. A l'inverse, il se forme de grandes boucles, appelées îles d'Orowan, autour des régions « dures »,

très denses en précipités. Nos simulations montrent des résultats similaires. C'est pourquoi il ne semble pas nécessaire de présenter à nouveau la configuration adoptée par une seule dislocation. Par contre, la microstructure simulée donnée en figure IV.7 met en évidence le comportement collectif des dislocations. Il ressort clairement que les dipôles se forment principalement entre les précipités qui sont les plus proches. Ces dipôles sont certainement rendus plus stables par la présence des obstacles forts que sont les carbures. Les séquences dynamiques mettent également en évidence un second aspect. Il est courant d'observer la remobilisation d'une dislocation bloquée entre deux carbures, provoquée par l'arrivée de nouvelles dislocations. Autrement dit, les interactions entre dislocations aident au passage de certains obstacles. Enfin, à titre d'illustration, après  $\gamma = 1\%$ , les carbures sont en moyenne encerclés par deux ou trois boucles d'Orowan. Celles-ci n'appartiennent généralement pas au même plan de glissement et donc ne proviennent pas des mêmes sources.

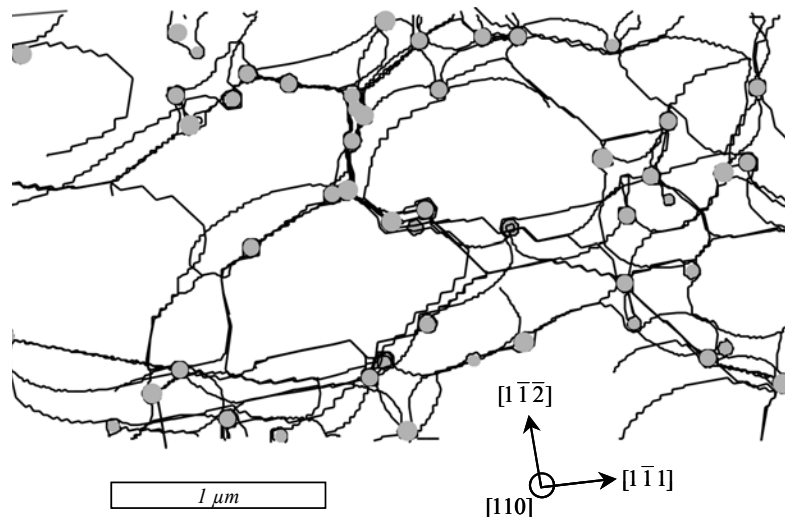


Figure IV.7. Microstructure simulée des dislocations obtenue sous chargement pour  $\gamma = 1\%$ . L'épaisseur de la lame est de  $0,2\ \mu\text{m}$ . Le plan d'observation coïncide avec le plan de glissement du système primaire. Les précipités sont représentés par les disques grisés. Les dipôles se forment principalement entre les carbures les plus proches.

La courbe de déformation est donnée en figure IV.8. Elle est comparée à la courbe de déformation obtenue sans distribution de carbures et avec la même configuration initiale de dislocations. Cette figure démontre clairement que la contribution à la contrainte d'écoulement associée aux seuls carbures est non négligeable dans les aciers de cuve. En soustrayant la friction d'alliage (de  $30\ \text{MPa}$ ), **la contrainte d'écoulement passe de  $14$  à  $40\ \text{MPa}$**  avec l'introduction des carbures au début de la déformation plastique ( $\gamma = 0,2\%$ ). La différence de pente entre les courbes avec et sans carbures illustre l'écrouissage associé à l'accumulation de

boucles d'Orowan autour des précipités. La contrainte d'écoulement augmente d'environ 10 MPa entre  $\gamma = 0,2$  et 1 %. Nous verrons par la suite que cet écrouissage peut être correctement décrit en prenant en compte les interactions élastiques qui existent entre les dislocations du système primaire et les boucles stockées autour des carbures. Les fluctuations qui apparaissent sur la contrainte d'écoulement avec carbures sont associées aux événements locaux de libération et d'arrêt des dislocations. Plus précisément, lorsque la contrainte appliquée n'est pas assez forte pour assurer la déformation plastique imposée (la densité mobile n'est plus suffisante), le chargement augmente jusqu'à la libération d'une ou plusieurs dislocations. N'étant plus retenues, ces dislocations sont très mobiles et la contrainte d'écoulement est à présent trop forte, ce qui conduit alors à la chute du chargement.

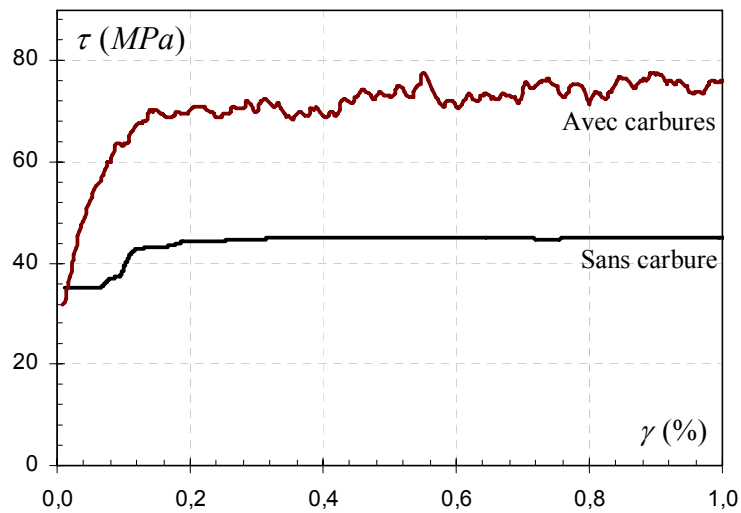


Figure IV.8. Courbes cisaillement correspondant au glissement simple d'un système interagissant avec lui-même, et interagissant également avec une distribution aléatoire de carbures. La configuration initiale des dislocations est identique pour les deux simulations.

Un des intérêts majeurs des simulations de DD vient de sa capacité à intégrer statistiquement de nombreux événements individuels pour reconstruire une réponse macroscopique. Il est donc important de vérifier si la déformation simulée est statistiquement suffisante. La relation d'Orowan permet de définir un incrément de cisaillement sous la forme :  $\Delta\gamma = Ab/V$ .  $A$  est l'aire balayée par les dislocations appartenant à un volume  $V$ . Au cours de cette aire balayée les dislocations ont coupé  $n = \rho_p A$  carbures de densité surfacique  $\rho_p$ . Au final, le nombre de carbures intersectés s'écrit :  $n = \rho_p V \Delta\gamma / b$ . L'application numérique partant de  $\rho_p = 2 \cdot 10^{12} \text{ m}^{-2}$  et  $V = 8,6 \cdot 10^{-18} \text{ m}^3$  conduit à estimer  $n$  de l'ordre de 200 carbures à la fin du régime transitoire ( $\gamma = 0,2 \%$ ). Cette valeur est en accord avec le critère statistique défini par Monnet [Monnet 2006a].

A titre d'illustration, en fin de simulation ( $\gamma = 1\%$ ), plus de 1000 carbures ont été balayés.

### Evolution de la densité de dislocations

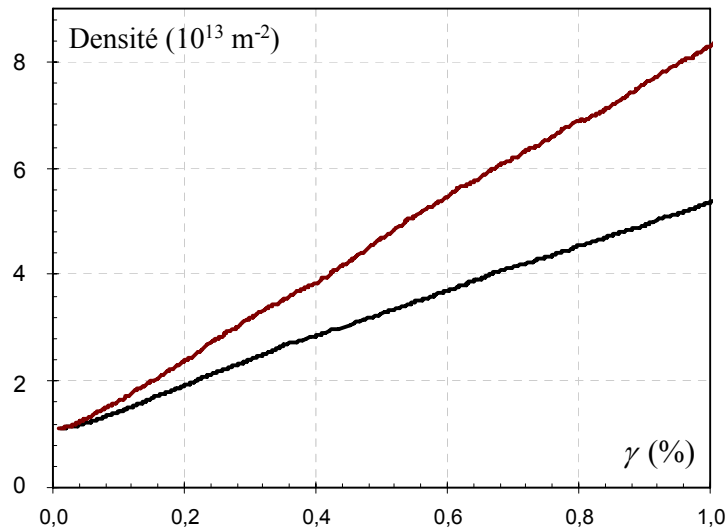


Figure IV.9. Evolution de la densité du système primaire avec le cisaillement sans (en trait noir) et avec particules (en trait rouge).

Les évolutions de la densité du système primaire en fonction de la déformation plastique avec et sans carbures sont présentées en figure IV.9. L'introduction d'obstacles infranchissables augmente fortement la densité, mais son évolution reste quasi-linéaire en fonction de la déformation plastique. L'accumulation de dislocations due aux carbures est par conséquent caractérisée par un taux de stockage constant. Il est raisonnable de penser que l'accumulation de dislocations par le mécanisme de la forêt (en l'occurrence ici sous forme de dipôles) n'est pas en compétition avec la formation de boucles d'Orowan autour de précipités. Autrement dit, la formation de boucles autour des carbures n'affecte pas la densité de dislocations stockées sous forme de dipôles ou multipôles, et inversement. Il s'agit bien de mécanismes de stockage découplés. Par conséquent, l'accumulation globale qui découle de ces deux mécanismes correspond simplement à la somme des taux de stockage respectifs. En l'absence de glissement dévié, on peut penser que le stockage de dislocations sous forme de dipôles est identique avec ou sans la distribution de carbures.

Considérant ces observations, il est possible de définir un modèle simple pour le stockage induit par les carbures. Considérons une dislocation qui balaie une aire  $A$  dans un volume  $V$ . Au court de ce trajet elle a contourné  $\rho_p A$  particules si  $\rho_p$  est la densité surfacique des carbures. Chaque carbure contourné, est entouré d'une boucle d'Orowan circulaire. On suppose que la dislocation passe pour la première fois dans ce plan de glissement. En moyenne les boucles d'Orowan ont un périmètre valant  $2\pi r_{eff}$  avec  $r_{eff}$  le rayon effectif des carbures qui est inférieur

au rayon  $r$  des carbures. Cette différence est liée au fait que le plan de glissement de la dislocation ne passe pas systématiquement par le centre des précipités. Nembach [Nembach 1996] démontre que  $r_{eff} = \frac{\pi}{4} r$ . Au final l'accumulation de dislocations  $\Delta\rho$  sous forme de boucles s'écrit ainsi :

$$\Delta\rho = \frac{2\pi r_{eff} \rho_p A}{V} \quad \text{Équation IV.8}$$

Au court de cette même aire balayée la dislocation a fourni un incrément de déformation qui s'écrit suivant la relation d'Orowan :

$$\Delta\gamma = \frac{Ab}{V} \quad \text{Équation IV.9}$$

Au final, le taux de stockage associé à l'accumulation de boucles d'Orowan autour des carbures est, par définition, le rapport des deux précédentes grandeurs :

$$\frac{\Delta\rho}{\Delta\gamma} = \frac{\pi^2 r \rho_p}{2b} \quad \text{Équation IV.10}$$

Cette dernière relation ne fait apparaître que la densité, le diamètre des particules ainsi que le vecteur de Burgers. L'application numérique avec  $r = 0,1 \mu\text{m}$  et  $\rho_p = 2 \cdot 10^{12} \text{ m}^{-2}$  conduit à un taux de stockage de  $3 \cdot 10^{15} \text{ m}^{-2}$ . Or la différence des pentes des évolutions de densités de la figure IV.9, conduit au même taux de stockage. Pour  $\gamma = 1 \%$ , la différence de densité avec et sans carbures vaut en effet  $3 \cdot 10^{13} \text{ m}^{-2}$ . Ainsi, ce modèle très simple, basé sur des hypothèses géométriques, reproduit correctement le stockage induit par des carbures impénétrables.

### Comparaison avec les modèles de la littérature

La confrontation de nos résultats avec les modèles analytiques de la littérature est à présent recherchée. Mais cette comparaison ne peut être réalisée directement puisque la simulation de DD est la résultante de deux mécanismes de durcissement différents. D'une part, les interactions avec les carbures, mais également les interactions dipolaires qui sont loin d'être négligeables considérant la forte densité de dislocations qui est utilisée ici (voir chapitre III). La superposition de mécanismes de durcissement différents est un épineux problème pour lequel il n'existe pas de solution unique. Il sera longuement détaillé et discuté à la fin de ce chapitre. L'unique solution pour définir la contrainte induite par les carbures sans aucune ambiguïté consiste à rendre les interactions dipolaires négligeables. En ce sens, une seconde simulation assez semblable à celle du paragraphe précédent est réalisée. Le système actif est introduit avec une densité initiale très basse de  $3 \cdot 10^{10} \text{ m}^{-2}$ , sous la forme de grandes boucles de  $5 \mu\text{m}$ . La taille du volume de simulation est de  $10 \mu\text{m}$  et la microstructure de particules présente les mêmes caractéristiques que précédemment.

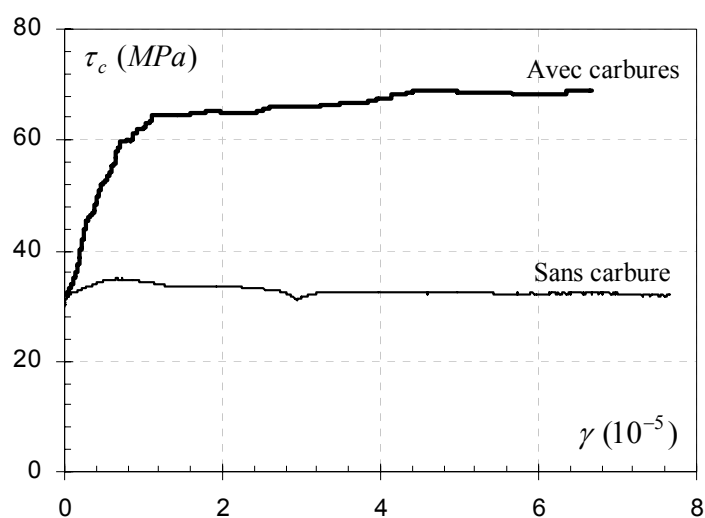


Figure IV.10. Evolution de la contrainte d'écoulement au cours de la simulation de l'interaction entre un système primaire de densité très basse, avec une distribution de carbures.

Tableau IV.2. Comparaison entre les résultats des simulations de DD et différents modèles analytiques du mécanisme d'Orowan.

Modèles	$\tau_p$ (MPa)
Orowan 1948	43
Foreman et Making 1966	35
Kocks 1967	37
Bacon <i>et al.</i> 1973	34
Hirsch et Humphrey 1969	41
Simulations de DD	$38 \pm 1$

Les courbes de déformation avec et sans carbures sont données en figure IV.10. Sans précipités la contrainte d'écoulement présente un léger pic lié à la contrainte pour activer les boucles, puis prend la forme d'un plateau à hauteur de 2 MPa, soustraction faite de la friction d'alliage. En présence de carbures, la courbe de déformation présente un net plateau à hauteur de 39 MPa. A cette valeur il faut soustraire les interactions dipolaires qui sont ici de 2 MPa, mais qui est proche de l'erreur numérique. Ainsi on définira simplement la **contrainte  $\tau_p$  associée aux carbures seuls comme égale à  $38 \pm 1$  MPa**. Il est intéressant de noter ici l'influence significative de la distribution aléatoire, comme le montre la comparaison avec la contrainte de 68 MPa qu'il coûte à une dislocation vis pour passer une rangée périodique de carbures de dimension et densité identiques (*cf.* partie IV.2).

La comparaison avec les prédictions des différents modèles analytiques présentés plus haut

[Orowan 1948, Foreman *et al.* 1966, Kocks 1967, Hirsch et Humphrey 1969] est donnée dans le tableau IV.2. Les différences entre prédictions sont étonnamment restreintes et ne dépassent pas 15 % des résultats de la simulation. Tout d'abord la relation simple proposée par Orowan [Orowan 1948] conduit à la plus forte surestimation de la contrainte liée aux carbures. C'est également le cas pour le modèle de Hirsch et Humphrey [Hirsch et Humphrey 1969]. Concernant ce dernier, il est possible d'expliquer la différence par le caractère aléatoire de la distribution. Le diamètre moyen d'intersection entre les plans de glissement avec les particules est en effet assez différent du diamètre des carbures. Le modèle proposé par Bacon *et al.* conduit à la valeur la plus basse des prédictions. Il faut noter que, suivant le formalisme de ce modèle, les dimensions caractéristiques des carbures des aciers de cuve correspondent à un angle critique proche de 66°. Enfin il est surprenant de constater le bon accord entre les modèles de Kocks [Kocks 1967] et Foreman [Foreman et Makin 1966] et les résultats des simulations DD. Il s'agit d'un cas particulier pour lequel l'application numérique fonctionne bien, puisque ces modèles ne tiennent pas compte ni de la dépendance en orientation de l'énergie de ligne ni des interactions dipolaires.

## **IV.2. Composition des mécanismes de durcissement par précipitation et de la forêt**

Le contrainte induite par les carbures est donc importante dans les aciers de cuve. Elle ne peut être négligée devant la contribution de la forêt. Il est donc nécessaire d'étudier la composition de ces deux mécanismes. Cette analyse fait l'objet de la dernière partie de ce chapitre.

### **IV.2.1. Revue des différents travaux de superposition de mécanismes**

L'objectif de cette section est d'une part de définir les lois de mélange classiques avec lesquelles sera recherchée la comparaison, et d'autre part d'explicitier les hypothèses sous jacentes. Il existe dans la littérature plusieurs revues à ce sujet dont nous reprenons certains points [Brown et Ham 1971, Kocks *et al.* 1975, Ardell 1985, Nembach 1996].

#### **Les lois de composition usuelles**

Pour simplifier dans ce qui suit, on considère la composition de seulement deux mécanismes de durcissement différents (notés 1 et 2). La contrainte d'écoulement totale qui tient compte des deux mécanismes est désignée par  $\tau_{tot}$ . Les lois présentées peuvent dans la majorité des cas, être généralisées à plus de deux mécanismes.

D'une manière générale les lois de composition usuelles se présentent sous la forme donnée

en équation IV.11 :

$$\tau_{tot}^k = \tau_1^k + \tau_2^k \quad \text{Équation IV.11}$$

L'exposant  $k$  prend des valeurs différentes suivant les hypothèses faites au sujet des forces et densités relatives entre les deux familles d'obstacles.

- La loi linéaire ( $k = 1$ ) est l'une des plus anciennes et la plus simple des lois de composition. Celle-ci ne donne généralement pas une bonne prédiction, excepté dans le cas de la présence de quelques obstacles forts parmi une majorité de faibles [Brown et Ham 1971, Kocks 1977].
- Koppenaar et Kuhlmann-Wilsdorf [Koppenaar et Kuhlmann-Wilsdorf 1964] montrent qu'une loi quadratique ( $k = 2$ ) décrit bien le durcissement induit par des obstacles de densités dissemblables mais de forces comparables. La relation proposée par Franciosi [Franciosi 1981] présentée au cours du chapitre III, dérive d'une loi de composition quadratique. Elle conduit à d'excellents résultats concernant la superposition des diverses interactions entre dislocations, de forces et densités disparates.
- Labusch [Labusch 1970] a proposé une loi de composition dont l'exposant  $k$  vaut  $3/2$ . Les densités des obstacles sont supposées comparables, quelles que soient leurs forces relatives.
- Enfin certaines études de DD [Mohles 2003] et la plupart des travaux expérimentaux [Reppich *et al.* 1986, Büttner *et al.* 1986, Mangen *et al.* 1988] utilisent l'équation IV.11 comme une relation empirique. L'exposant  $k$  est alors ajusté pour décrire au mieux les résultats observés.  $k$  varie généralement entre 1 et 2.

Brown et Ham [Brown et Ham 1971] proposent une loi de composition dans laquelle la contrainte associée à chacun des mécanismes seuls est pondérée par la densité relative que le mécanisme représente dès lors qu'il est associé à un second mécanisme. Leur proposition, donnée en équation IV.12, fait intervenir les densités  $\rho_i$  de chacune des familles d'obstacles  $i$ .

$$\tau_{tot} = \left( \frac{\rho_1}{\rho_1 + \rho_2} \right) \tau_1 + \left( \frac{\rho_2}{\rho_1 + \rho_2} \right) \tau_2 \quad \text{Équation IV.12}$$

Ce dernier modèle n'a pas donné de bons résultats et a été finalement peu utilisé (*cf.* [Nembach 1996]).

### Validations numériques ou expérimentales

Il existe dans la littérature assez peu d'études portant sur la composition de mécanismes. Ce qui rend la validation des lois introduites précédemment difficile. La plupart des travaux expérimentaux font l'utilisation des lois empiriques et de rares simulations de DD montrent que les lois classiques ne semblent pas s'appliquer.



Nembach *et al.* [Nembach et Martin 1980, Büttner *et al.* 1987] ont étudié le problème de la superposition entre le durcissement par solution solide et par précipitation à l'aide d'expériences. La fraction volumique, la taille des précipités, ainsi que la teneur en solution solide sont variées indépendamment à l'aide de traitements thermiques appropriés. La loi quadratique obtenue dans la première étude [Nembach et Martin 1980] est remise en cause dans la seconde [Büttner *et al.* 1987] au profit d'une loi empirique avec un exposant  $k = 1,25$ . Mais la confiance que l'on peut avoir dans ce type d'approche est limitée. Les paramètres qui entrent en jeu dans les deux durcissements semblent difficiles à maîtriser. La distribution de taille de précipités en est le meilleur exemple, puisqu'il est difficile d'obtenir une distribution rigoureusement identique en terme de densité et de taille.

Toujours par la démarche expérimentale, Nembach et Chow [Nembach et Chow 1978] ont cherché à établir le durcissement induit par deux familles de précipités. Les distributions des deux familles sont modifiées là encore, par des traitements thermiques sensés agir séparément. La nature de l'interaction entre les dislocations et les précipités diffère en fonction de la taille de ces derniers. Les particules de plus grandes tailles ne sont pas cisailables. Malgré la différence de force qu'il existe entre les précipités, leurs résultats semblent être bien décrits par une loi quadratique, bien qu'à priori celle-ci ne devrait pas s'appliquer à ces conditions. Reppich *et al.* [Reppich *et al.* 1986] ont réalisé une étude similaire sur un autre matériau. A la différence de la première étude, les deux familles de précipités sont cohérents, et donc cisailables. Ces auteurs obtiennent ainsi que l'exposant  $k$  de l'équation IV.11 dépend de la force relative des deux types de précipités, et varie entre 1 et 2. Là encore, il semble difficile de maîtriser les multiples paramètres qui contribuent au durcissement total observé. Dans le cas de l'étude de Reppich, il faut souligner que leurs expériences mettent en jeu également le durcissement associé aux éléments en solution solide.

Enfin et pour être tout à fait complet, il est nécessaire de rappeler que les lois de composition présentées plus haut, supposent qu'il n'existe aucune synergie entre les deux mécanismes de durcissement [Nembach 1996]. Autrement dit, un mécanisme n'affecte pas le second. Cela est évidemment vrai en quasi-statique, dans le cas de la composition de deux familles de précipités et on peut supposer également que le mécanisme de la forêt et le durcissement par précipitation sont dissociés. Par contre des études, et notamment des travaux expérimentaux, ont montré l'existence de synergies entre certains mécanismes [Mangen et Nembach 1988, Nembach 1992, Nembach 1996]. A titre d'exemple, les effets de modules élastiques associés à des précipités sont affectés par la présence d'éléments en solution solide qui modifient la force d'interaction entre la dislocation et les précipités [Nembach 1992]. Ou encore, la présence de précipités peut modifier les effets d'échelles comme le montrent Nembach *et al.* [Mangen et Nembach 1988, Nembach 1992].

Au final, de multiples paramètres interviennent simultanément et il est difficile en pratique de dissocier des mécanismes différents de durcissement. A nouveau, dans ce contexte, les approches numériques, et en particulier la DD, présentent un apport certain puisque chacun des mécanismes peuvent varier de manière parfaitement indépendante au travers de ce que l'on peut appeler des expériences numériques.

Zhu *et al.* [Zhu *et al.* 1999] ont étudié la superposition du durcissement entre deux familles d'obstacles ponctuels et linéaires en faisant varier leurs forces relatives et leurs densités. Pour cela ils reprennent la démarche proposée par Foreman et Makin (*cf.* paragraphe IV.1.3 [Foreman et Makin 1966]). La principale nouveauté par rapport aux travaux de Foreman et Makin est la prise en compte du terme logarithmique de la tension de ligne. Mais la dépendance en orientation de cette dernière est introduite de manière artificielle, par le biais d'un préfacteur moyenné. Leurs résultats sont repris dans une loi de composition empirique dont l'exposant  $k$ , dépend de la force relative des deux familles d'obstacles.  $k$  est égale à deux pour des obstacles de forces comparables, et diminue lorsque la différence de force s'accroît. De plus les simulations de Zhu *et al.* négligent les interactions entre les dislocations. Et nous avons vu un peu plus haut, que ce dernier mécanisme affecte considérablement le mécanisme d'Orowan [Bacon *et al.* 1973].

Monnet [Monnet 2006a] a étudié, la composition des durcissements induits par deux familles de précipités impénétrables. Les deux distributions de précipités sont singulièrement différentes, tant en diamètres qu'en densités. Les résultats de Monnet montrent que les lois classiques de composition surestiment très nettement la contrainte totale, puisque la densité et la contrainte associée aux deux familles diffèrent de manières significatives. Partant de ce constat, Monnet a proposé une loi de composition qui pondère la force de chaque famille par leur concentration. Ainsi la contrainte totale s'écrit suivant la forme:

$$\tau_{tot} = \frac{\tau_1 l_2 + \tau_2 l_1}{\sqrt{l_1^2 + l_2^2}} \quad \text{Équation IV.13}$$

dans laquelle interviennent les distances moyennes entre obstacles  $l_i$ . Cette loi de mélange reproduit correctement les résultats de cette étude.

Pour finir, il est intéressant de signaler l'étude menée par Mohles [Mohles 2003]. L'originalité de ce travail réside dans le fait qu'il ne s'agit pas de la composition de deux familles d'obstacles distinctes, mais de deux interactions différentes. La première est associée au mécanisme d'Orowan et la seconde est induite par des effets de modules de cisaillement. Mohles montre qu'une loi empirique reproduit bien les résultats de ses simulations. L'exposant  $k$  intervenant dans l'équation IV.11 prend la valeur de 2,5, ce qui est bien supérieur à l'exposant généralement obtenu (inférieur à 2) dans le cas de deux obstacles de natures différentes.

#### IV.2.2. Simulations avec forêt et carbures

La section précédente révèle deux points d'importance: (i) les lois classiques ne semblent pas pouvoir s'appliquer dans le cas d'obstacles trop contrastés en terme de densités et de forces, (ii) la composition du mécanisme de la forêt et d'Orowan n'a jamais fait l'objet de travaux tant expérimentaux que numériques. Nous allons dans ce qui suit, chercher à répondre à cette problématique. Discuter la composition de deux mécanismes ne peut être fait de manière pertinente seulement si au moins un des mécanismes est varié. Pour cela, la forêt offre un certain degré de liberté dans la mesure où les différentes réactions entre dislocations n'ont pas toute la même force (*cf.* calculs des coefficients du chapitre III).

##### Simulations de l'écroissage latent

La composition des mécanismes de la forêt et d'Orowan est recherchée à l'aide des simulations de l'écroissage latent, à l'image de celles présentées dans le chapitre III. Les microstructures initiales de dislocations sont identiques pour les deux séries de simulations avec et sans carbures. La comparaison des contraintes d'écoulement en sera plus aisée. Pour rappel, ces simulations portent sur l'interaction entre un système primaire sous l'action d'un chargement extérieur, avec un système forêt de densité fixe. La réaction entre ces deux systèmes conduit à un seul type de réaction. La différence avec les simulations du chapitre III vient de l'introduction d'une distribution aléatoire de carbures représentative des aciers de cuve. Les paramètres de contrôle des simulations sont repris des simulations du Chapitre III. Ces simulations sont relativement coûteuses en temps de calculs. La forte courbure des dislocations autour des carbures induit en effet une discrétisation localement fine, et donc conduit à travailler avec un grand nombre de segments. C'est pourquoi, elles sont stoppées peu après la fin du régime transitoire, aux alentours de 0,3 % de cisaillement.

Comme le montre les microstructures de dislocations sous chargement données en figure IV.11, les différences entre les interactions qui ont été observées au chapitre III sont retrouvées ici. Les dislocations primaires sont très courbées dans le cas de l'annihilation colinéaire, plus qu'elles ne le sont entre des jonctions. Ensuite, la comparaison entre les microstructures associées aux jonctions montre que les dislocations primaires sont plus courbées entre les jonctions mixtes symétriques. La courbure des dislocations est à relier à la force des obstacles avec lesquels elles interagissent. La hiérarchie des interactions semble donc être conservée malgré l'introduction des carbures. D'autre part, les dislocations se libèrent des jonctions pour des angles bien inférieurs à celui nécessaire pour contourner les carbures. Ce qui confirme *a posteriori* que les carbures sont des obstacles nettement plus forts que les jonctions. Par contre, il n'en va pas de même de l'interaction colinéaire qui est une réaction très forte.

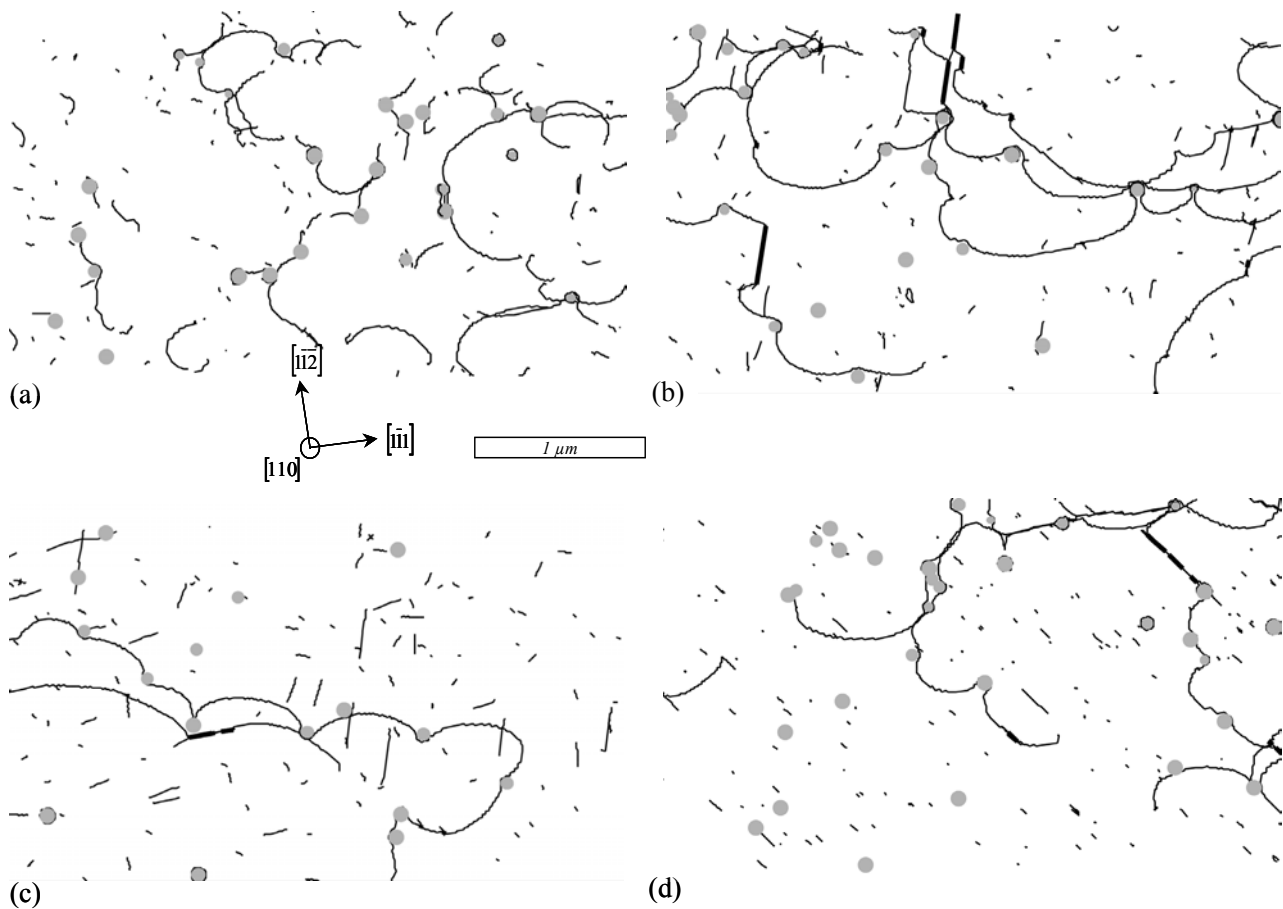


Figure IV.11. Microstructures simulées de dislocations de l'interaction entre un système primaire avec un type de forêt et une distribution aléatoire de carbures. L'épaisseur des lames est de  $0,06 \mu\text{m}$  et  $\gamma = 0,25 \%$ . Le plan d'observation correspond au plan de glissement du système primaire. L'interaction entre les deux systèmes conduit à une annihilation (a), une jonction mixte symétrique (b), une jonction mixte asymétrique (c) et une jonction coin (d). Les carbures sont illustrés par les cercles grisés.

La comparaison de la figure IV.11 avec les microstructures du Chapitre III montre que les jonctions sont moins longues en présence des carbures. Cette évolution est chiffrée dans le tableau IV.3, qui reporte les longueurs moyennes pour les différentes jonctions. Les jonctions mixtes symétriques et celles coins sont réduites de l'ordre de 30 % en présence des précipités. Cette évolution peut être qualitativement expliquée comme suit : la présence des carbures réduit la longueur libre des bras des jonctions qui sont par conséquent plus difficiles à courber, et ainsi les jonctions dans cette série de simulation ne peuvent se « zipper » sur une distance équivalente à celle sans carbure. Il est toutefois surprenant que cela ne soit pas le cas des jonctions mixtes asymétriques dont la longueur moyenne n'est pas affectée.

Les courbes de déformation sont présentées en figure IV.12 pour les quatre réactions étudiées. Elles sont séparées en deux groupes. Les courbes obtenues au Chapitre III, sans

carbure sont également reportées. En présence de précipités, le régime stationnaire semble atteint aux alentours de 0,2 % de cisaillement. Comme cela a été montré dans les chapitres précédents, la statistique est suffisante dès 0,2 % de cisaillement. Les dislocations du système primaire ont interagi avec plus d'une centaine de chaque type d'obstacles, forêt et carbures, ce qui est en accord avec le critère statistique défini par Monnet [Monnet 2006]. La comparaison de chaque paire de courbes, respectivement avec et sans carbures, montre à nouveau que la contrainte supplémentaire associée aux carbures est significative. Il varie suivant la nature de la réaction entre 20 et 30 MPa.

Tableau IV.3. Longueurs moyennes des différentes jonctions au cours des simulations de l'érouissage latent, en fonction de la présence ou non de carbures.

Interaction	Longueurs moyennes des jonctions ( $\rho^{-1/2}$ )	
	Sans carbure	Avec carbures
Jonction mixte symétrique	$0,45 \pm 0,05$	$0,31 \pm 0,04$
Jonction mixte asymétrique	$0,2 \pm 0,04$	$0,2 \pm 0,03$
Jonction coin	$0,2 \pm 0,04$	$0,12 \pm 0,02$

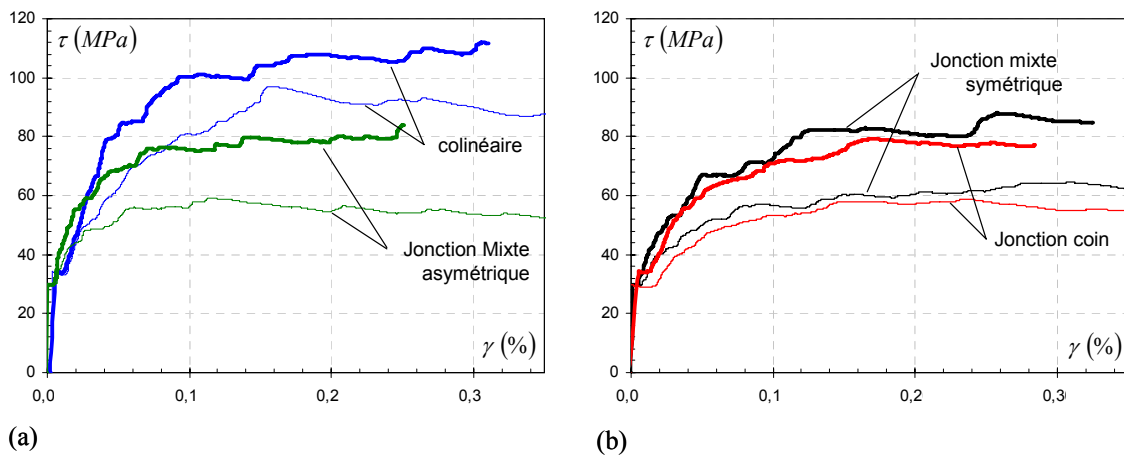


Figure IV.12. Courbes cisaillement-tension des simulations de l'érouissage latent pour les différentes réactions et en fonction de la présence d'une distribution de carbures (en trait épais). Les courbes en trait fin rappellent les résultats sans la présence de carbure (cf. Chapitre III).

### Comparaison avec les lois de superposition

Pour simplifier ce qui suit, toutes les contraintes sont soustraites de la composante liée à la friction d'alliage de 30 MPa. Afin de discuter de la superposition des deux mécanismes nous allons comparer la prédiction des lois de mélange de la littérature avec les résultats de nos simulations, c'est-à-dire :

- d'une part, définir la prédiction à l'aide des lois de composition présentées précédemment. Les contraintes associées à chacun des mécanismes séparés sont issues des simulations de DD : celle du paragraphe IV.1.3 concernant le mécanisme d'Orowan, et les simulations de l'écroissage latent pour le mécanisme de la forêt. Comme les courbes de déformation de ces dernières présentent un pic de multiplication, les contraintes sont prises sur le domaine de déformation qui ont servi à définir les coefficients d'interaction (*cf.* chapitre III). Le tableau IV.4 rappelle l'ensemble de ces contraintes pour chaque mécanisme individuel.
- D'autre part, la comparaison est faite avec les simulations de l'écroissage latent avec carbures, qui sont présentées dans le paragraphe précédent. Puisque les courbes de déformation correspondantes sont relativement bruitées, il est plus prudent de définir les contraintes comme la valeur convergée entre 0,2 % et la fin des simulations. Pour être tout à fait rigoureux, ces simulations de l'écroissage latent mettent en jeu trois contributions distinctes. Les contributions liées à l'interaction avec les carbures et les systèmes de la forêt. Mais il ne faut pas oublier les interactions dipolaires qui sont ici plus importantes à cause du stockage sous forme de boucles d'Orowan. Toutefois, à la vue de la déformation encore faible, et des fluctuations de l'ordre 5 MPa sur les courbes de déformation, négliger la différence de densité primaire qui existe avec et sans carbure n'est pas critique.

Tableau IV.4. Valeurs des contraintes d'écoulement (en MPa) pour chacune des interactions de la forêt, et du mécanisme d'Orowan seul.

Dipolaire	Colinéaire	J. mixte symétrique	J. mixte asymétrique	J. coin	Carbures
15	61	27	21	22	38

Les prédictions des lois de mélange sont comparées aux résultats des simulations de DD dans le tableau IV.4. La comparaison avec la loi quadratique [Koppenaar et Kuhlmann-Wilsdorf 1964] n'est pas présentée au profit de celle proposée par Franciosi [Franciosi *et al.* 1981], qui est une variante. Son utilisation implique de définir un coefficient d'interaction  $a_p$  associé aux interactions avec les carbures et fait intervenir la seule densité surfacique  $\rho_p$ . La contrainte associée aux carbures seuls a été mesurée égale à 38 MPa et elle s'écrit  $\mu b \sqrt{a_p \rho_p}$ . Il suit alors un coefficient  $a_p$  égal à 1,1. Par la suite, la relation de Franciosi sera généralisée de la manière suivante :

$$\tau_c^i = \mu b \sqrt{\sum_j a^{ij} \rho^j} + \tau_F \quad \text{Équation IV.14}$$

Dans l'équation IV.14, la sommation porte désormais sur tous les obstacles  $j$  que peut

rencontrer le système  $i$ , que cela soit des dislocations ou des précipités.

Tableau IV.5. Comparaison entre les contraintes d'écoulement simulées induites par une distribution de carbures et des systèmes de la forêt et les prédictions des différentes lois de composition de la littérature. 'J.' signifie jonction. Toutes les contraintes sont en MPa.

Interaction	Loi linéaire	[Labusch 1970]	[Franciosi 1981]	[Monnet 2006]	<b>DD</b>
Dipolaire	53	44	40	27	<b>40 ± 1</b>
Colinéaire	99	80	77	70	<b>78 ± 3</b>
J. mixte symétrique	65	52	48	38	<b>52 ± 3</b>
J. mixte asymétrique	58	47	44	32	<b>48 ± 2</b>
J. coin	60	48	45	34	<b>48 ± 2</b>

Le tableau IV.5 montre que les lois peuvent être classées selon trois groupes, en fonction de leur accord avec les résultats de la DD :

la loi de mélange proposée par Monnet sous estime systématiquement la contrainte d'écoulement simulée. On notera que cette erreur est moins forte pour l'annihilation colinéaire, qui est une réaction pratiquement aussi forte que les carbures. Un cas qui correspond effectivement plus à la superposition de deux obstacles forts pour laquelle cette loi a été proposée.

L'accord entre les lois proposées par Franciosi et Labusch avec les résultats des simulations de DD est très bon. Le succès de la loi proposée par Labusch ( $k = 3/2$ ) est à première vue, surprenant puisque les deux familles d'obstacles présentent des densités séparées d'un ordre de grandeur. Mais et cela a été vu au chapitre III, la distance entre deux réactions de la forêt est bien supérieure à  $\rho_f^{-1/2}$  [Devincre *et al.* 2006]. Elle est proche de  $(\beta_f \rho_f)^{-1/2}$ , équivalent à  $3 \rho_f^{-1/2}$  (0,6  $\mu\text{m}$ ) dans l'exemple d'une jonction mixte symétrique. La distance entre deux jonctions est donc comparable à la distance entre deux carbures (autour de 0,58  $\mu\text{m}$ ), ce qui explique que la relation de Labusch donne ici de bons résultats.

Enfin la loi linéaire donne lieu à une surestimation assez importante de toutes les contraintes. Cela n'est pas surprenant dans la mesure où elle est plus appropriée dans le cas de quelques obstacles forts au sein d'une majorité de faibles.

Dans l'objectif de disposer d'un modèle prédictif pour la suite, un choix est nécessaire entre les lois de Franciosi et Labusch. Notre choix se porte vers la loi de mélange quadratique proposée par Franciosi. Même si elle est à priori basée sur l'hypothèse d'obstacles de force identiques, elle donne pourtant de très bons résultats concernant la superposition des interactions entre dislocations pourtant de nature très contrastées.

### Validation de la loi de composition retenue

Dans l'objectif de tester l'aspect prédictif de la loi mélange de Franciosi, nous allons réaliser une simulation massive plus réaliste, qui rend compte des diverses interactions avec tous les systèmes de glissement. Il s'agit d'une simulation en glissement simple. Le choix de la direction de chargement se porte vers l'axe [1 5 11], qui est au centre du triangle standard. La densité totale de dislocations est de  $10^{14} \text{ m}^{-2}$ , les paramètres de la simulation sont adaptés à la longueur caractéristique  $\rho^{-1/2} = 0,1 \text{ }\mu\text{m}$  dans le cas présent. Le volume de simulation présente un côté de  $1,2 \text{ }\mu\text{m}$  ( $> 10 \rho^{-1/2}$ ). La densité sur le système primaire est doublée par rapport à celle des onze autres systèmes afin d'éviter un pic de multiplication. La microstructure initiale est construite à partir de boucles de dislocations, boucles dipolaires pour les systèmes non actifs, et boucles planaires pour le système primaire. Une distribution de carbures est introduite dans le volume simulé, de densité et de tailles représentatives des aciers de cuve.

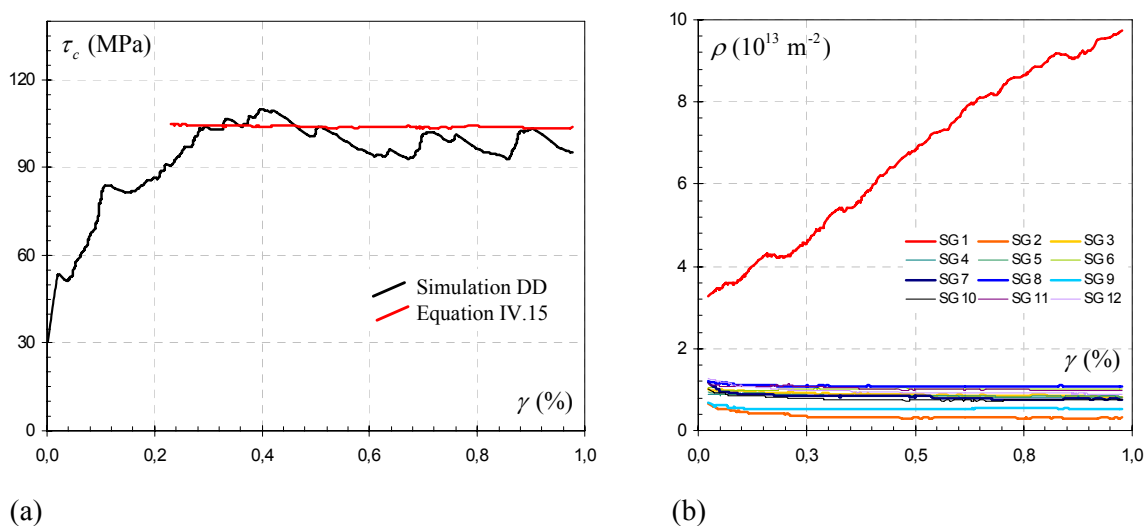


Figure IV.13. (a) Contrainte d'écoulement en fonction du cisaillement obtenue lors de la traction en glissement simple et en présence de carbures, comparée à la prédiction réalisée à l'aide de la loi de composition proposée. (b) Evolution des densités des systèmes de glissement au cours de la déformation.

Afin de rester cohérent avec la formulation proposée au Chapitre III, il est nécessaire de tenir compte de la déviation des coefficients d'interaction avec la densité des systèmes. La contrainte d'écoulement sur le système primaire s'écrit alors :

$$\tau_c = \mu b \sqrt{\sum_j \chi \beta_j \rho_j} + \beta_p \rho_p + \tau_F \quad \text{Équation IV.15}$$

La sommation porte sur toutes les interactions  $j$ . Les coefficients  $\beta_j$  et le facteur  $\chi$  ont été déterminés au chapitre III :



$$\chi = \left[ \frac{\ln(b\sqrt{\beta_j\rho_j})}{\ln(b\sqrt{\beta_j\rho_{ref}})} \right]^2 \quad \text{Équation IV.16}$$

La densité de référence  $\rho_{ref}$  à laquelle a été déterminée le coefficient  $\beta_j$  est de  $2 \cdot 10^{13} \text{ m}^{-2}$ . Concernant les carbures,  $\beta_p$  prend la valeur de 1,1 puisque la densité est la même que celle utilisée pour définir  $a_p$ . Le détail de la démarche de reconstruction a été défini au chapitre précédent, et seuls quelques points sont rappelés. La prédiction de la contrainte d'écoulement requiert la connaissance de l'évolution des différentes densités de dislocations au cours de la déformation plastique. Elles sont obtenues à partir de la simulation, et sont reportées dans la figure IV.13. La contrainte d'écoulement correspond en théorie à la cission critique la plus basse qui est obtenue pour le système le plus actif. Pour un axe  $[1 \ 5 \ 11]$ , le facteur de Schmid est maximal pour le système  $\frac{1}{2} [1 \bar{1} 1] (110)$  (n° 1 de notre nomenclature *cf.* tableau III.1). Il est vérifié que la cission critique sur le système n°1 est à la fois la plus basse et correspond bien à la contrainte appliquée. Pour des raisons de clarté, la prédiction du modèle n'est reproduite que pour le système  $\frac{1}{2} [1 \bar{1} 1] (110)$ .

Comme le montre la figure IV.13, la contrainte d'écoulement obtenue par simulation est un peu accidentée, ces fluctuations peuvent être associées aux événements d'arrêts et de remobilisations des dislocations induits par les carbures. Le régime transitoire se termine aux alentours de  $\gamma = 0,3 \%$ , suit ensuite un plateau à hauteur de 100 MPa. La densité du système primaire passe de  $3 \cdot 10^{13}$  à pratiquement  $10^{14} \text{ m}^{-2}$ . L'écroutissage associé à l'augmentation des interactions dipolaires est faible devant les contributions de la forêt et des carbures. De plus, l'augmentation des interactions dipolaires est compensée par la diminution des interactions colinéaires puisque la densité des systèmes colinéaires se réduit tout au long de la déformation simulée. Cette diminution est liée au fait que, en condition de glissement simple et en l'absence de glissement dévié, il n'existe aucun mécanisme de multiplication pour les systèmes colinéaires.

Une fois le domaine transitoire achevé, l'accord entre le modèle et la simulation est bon. La contrainte prédite semble toutefois surestimer légèrement la contrainte d'écoulement en fin de simulation. Mais cette différence est de l'ordre de 5 MPa, ce qui est négligeable devant le niveau de contrainte atteint et les fluctuations de la simulation. Il faut souligner que le présent test de validation de l'équation IV.15 est un test drastique. En effet les mécanismes de durcissements qui sont superposés ici sont associés à des obstacles de forces très différentes, allant de jonctions faibles à des carbures impénétrables, ainsi que de densités très inégales. Enfin, Il faut souligner que **la contrainte définie à partir de la figure IV.13 est en quelque sorte une mesure de la cission critique du monocristal de ferrite des aciers de cuve, à l'état non irradié.**

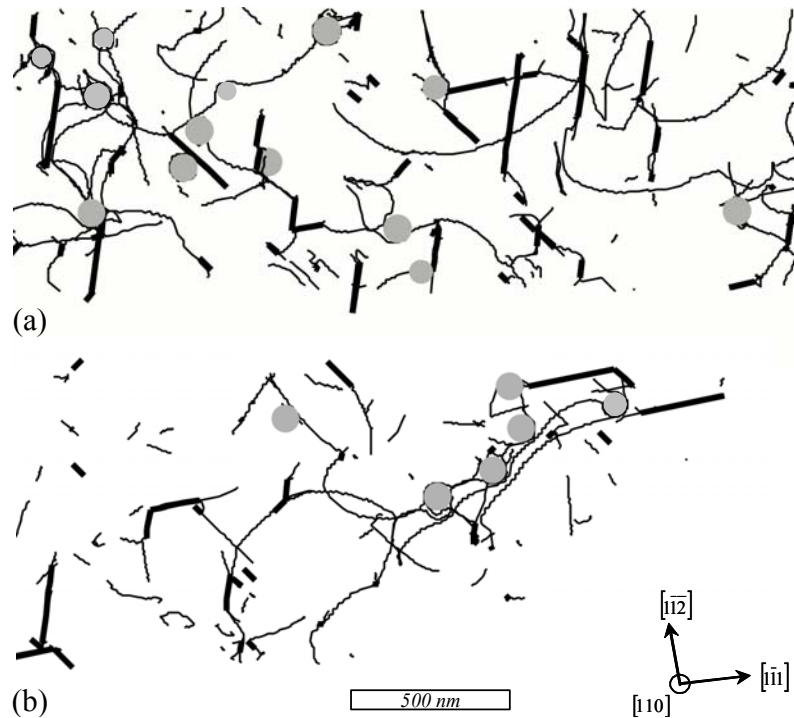


Figure IV.14. Deux microstructures simulées de dislocations obtenues sous chargement, après 0,7 % de cisaillement. L'épaisseur des lames minces est de 0,08  $\mu\text{m}$ . Le plan d'observation coïncide avec le plan de glissement du système actif. Les jonctions sont en gras et les carbures en gris.

A l'image du travail réalisé en fin de chapitre III, il est possible de discuter les contributions relatives des différents mécanismes élémentaires de durcissement mis en jeu. Ainsi, soustraction faite de la friction d'alliage et en fin de déformation, le mécanisme de la forêt constitue la contribution majeure à la contrainte d'écoulement avec près de 70 %. En outre, la contribution des carbures représente environ 25 %, et les interactions dipolaires ne constituent qu'une petite portion de la contrainte d'écoulement (5%) malgré la forte multiplication du système primaire.

Deux lames minces observées sous chargement sont données en figure IV.14. Elles constituent en quelque sorte une synthèse des observations réalisées jusqu'à présent à la fois sur les mécanismes de la forêt et d'Orowan. Les carbures et l'annihilation colinéaire constituent les deux plus forts obstacles au déplacement des dislocations. On retrouve quelques boucles débris, et des sectionnements de dislocations qui sont des conséquences de l'annihilation colinéaire. La figure IV.14.b fait apparaître un empilement de trois dislocations primaires devant une région relativement plus dense en carbures. La comparaison avec la microstructure donnée en figure III.13, montre que les jonctions sont moins longues en présence de carbures. Il semble aussi que la répartition des jonctions soit plus homogène en présence de carbures.

### IV.3. Discussion du rôle des barrières microstructurales de la bainite

La revue des observations expérimentales du premier chapitre a mis en évidence le manque d'information concernant les interfaces qui séparent les lattes et les paquets de lattes. Il est généralement suggéré que les lattes sont séparées par des joints de faible désorientation (moins de 2°) [Bhadeshia 2000]. Les joints entre paquets de lattes dépendent des variantes de la relation d'orientation entre la ferrite et l'austénite mère dont elle est issue. Mais, il s'agit dans la plupart des cas d'angles de désorientation assez importants (moins de 20° et autour de 60°) [Gourgues *et al.* 2001]. Les joints de lattes sont donc généralement assimilés à des murs de dislocations. Certaines observations microscopiques révèlent des microstructures de dislocations qui pourraient s'apparenter à ces interfaces (*cf.* figure I.9.b [Karlik, 2002]). Par contre, il n'existe à l'heure actuelle aucune caractérisation concernant le nombre et la nature des dislocations qui constituent ces parois.

L'interaction entre les dislocations et ces interfaces est complexe [Priester 1984]. Les dislocations qui arrivent peuvent réagir avec les dislocations de la paroi suivant leur nature. Elles sont ensuite bloquées dans l'interface et peuvent parfois la traverser. Mais les paramètres qui contrôlent ces mécanismes sont encore mal connus. Il existe quelques simulations de DD qui portent sur le rôle des murs de dislocations. Mais, elles se limitent pour le moment au cas le plus simple d'une paroi constituée de dislocations d'un seul système [Bulatov *et al.* 2001].

Partant de ce constat, nous discutons simplement un cas limite. La configuration la plus sévère en terme de durcissement consiste à assimiler les lattes individuelles comme des volumes hermétiques aux dislocations. On va supposer également que la ferrite se présente plutôt sous forme de lattes (de dimensions  $A \approx B \ll C$ ) que de plaquettes. Les dislocations sont donc confinées entre les parois qui sont séparées d'une distance de l'ordre de  $A$  la largeur de la latte. La contrainte de confinement  $\tau_{conf}$  est donc liée à la contrainte nécessaire à courber les dislocations entre les interfaces. Il s'agit d'un effet de tension de ligne. Les caractérisations microstructurales ont défini la largeur moyenne des lattes de 2  $\mu\text{m}$  [Haušild 2002].  $\tau_{conf}$  peut donc être estimée en début de déformation plastique de l'ordre de 10 MPa à partir de la relation d'Orowan  $\mu b/A$ . Cette contrainte est nettement inférieure aux contributions des autres mécanismes de durcissement présents. En supposant que la loi de mélange quadratique, obtenue pour la composition des mécanismes de la forêt et d'Orowan, est toujours valable, il suit :

$$\tau_c = \tau_F + \sqrt{\tau_{forêt}^2 + \tau_{carbures}^2 + \tau_{conf}^2} \quad \text{Équation IV.17}$$

Finalement l'application numérique, avec  $\tau_{forêt} = 70$  MPa (*cf.* chapitre III) et  $\tau_{carbures} = 38$  MPa, conduit à modifier la contrainte d'écoulement de 1 MPa. A petites déformations, l'effet de confinement sur la contrainte d'écoulement est donc négligeable. Par contre, la présence de ces interfaces induit un stockage important de dislocations. A titre

d'illustration, le libre parcours des dislocations a été estimé à 34  $\mu\text{m}$  en glissement simple et à 14  $\mu\text{m}$  en glissement double au cours du chapitre III. Or ces valeurs sont nettement supérieures à la largeur des lattes.

Le plan d'habitat des lattes de bainite supérieure est généralement un plan  $\{110\}$ , tandis qu'il semble irrationnel pour la bainite inférieure (*cf.* chapitre I). Dans le cas particulier des aciers de cuve, le plan d'habitat des lattes de ferrite n'est pas connu. Donc sauf cas particulier, la plupart des systèmes de glissement sont limités, de part les joints de lattes, à une surface d'environ  $AB$ . Selon la relation d'Orowan, une boucle de dislocation peut donc fournir un incrément de déformation  $\Delta\gamma = AB b / V$ , avant d'être bloquée sur les interfaces.  $V$  est le volume de la latte. Si l'on suppose toujours que les lattes sont hermétiques, on a alors stocké sur tout le périmètre une longueur de dislocation de  $2(A + B)$ . Cela correspond à une augmentation de densité de  $\Delta\rho = 2(A + B) / V$ . Le taux de stockage associé aux interfaces est le rapport de ces deux grandeurs, il suit  $\Delta\rho/\Delta\gamma = 2(A + B) / AB b$ . L'application numérique avec  $A = B = 2 \mu\text{m}$ , conduit à estimer le taux de stockage à  $8 \cdot 10^{15} \text{ m}^{-2}/\%$ . Cette valeur est très supérieure au taux de stockage de la forêt ( $2,5 \cdot 10^{15} \text{ m}^{-2}/\%$  en glissement double par exemple) et celui associé à la formation de boucles d'Orowan autour des précipités ( $3 \cdot 10^{15} \text{ m}^{-2}/\%$ ). Les observations réalisées au MET par Robertson *et al.* [Robertson *et al.* 2007] suggèrent également un stockage de dislocations important au niveau des joints de lattes.

Afin d'approfondir les effets d'échelle qui ont lieu notamment à plus forte déformation dans les aciers de cuve, on pourrait s'inspirer des travaux récents réalisés sur ce sujet. Lefebvre *et al.* [Lefebvre *et al.* 2006] ont étudié à l'aide de simulation de DD à deux dimensions l'effet Hall-Petch induit par des grains micrométriques. Toujours concernant l'effet Hall-Petch, De Sansal [De Sansal 2007] a proposé un modèle constitutif pour reproduire dans un code de plasticité cristalline, le stockage de dislocations sur des joints observé dans des simulations de DD à trois dimensions. Enfin, Chaussidon [Chaussidon 2007] a récemment étudié par DD les effets d'échelle qui existent dans un acier 16MND5.

## Résumé

---

Les carbures des aciers de cuve sont assimilés à des particules sphériques impénétrables. L'introduction d'une force d'interaction entre les carbures et les dislocations n'est pas nécessaire. Les densité et diamètre caractéristiques des carbures des aciers 16MND5 sont déterminés à partir d'observations MEB.

Le durcissement induit par une rangée périodique infinie de carbures est d'abord étudié et permet de vérifier l'importance des interactions dipolaires sur le mécanisme d'Orowan. Un modèle simplifié a été proposé pour décrire l'érouissage induit par l'accumulation de boucles d'Orowan autour des carbures.

Les simulations massives portant sur une distribution de carbures montre que le durcissement associé à ces derniers n'est pas négligeable dans les aciers de cuve. La plupart des modèles analytiques de la littérature surestiment la contrainte d'écoulement simulée. Un modèle basé sur la géométrie et la distribution des carbures est proposé pour rendre compte du taux de stockage sous forme de boucles autour des précipités.

Comme le mécanisme de durcissement par précipitation n'est pas négligeable devant les interactions avec la forêt, la composition entre ces deux mécanismes est étudié. Pour cela, les simulations de l'érouissage latent sont reprises, en y ajoutant une distribution de carbures. Les résultats de la DD sont comparés aux lois de compositions usuelles et parmi elles la relation quadratique proposée par Franciosi et al. [Franciosi et al. 1981] permet de bien reproduire la contrainte d'écoulement simulée.

Cette loi de mélange est finalement validée par la simulation d'une traction en glissement simple, en présence de tous les systèmes de la forêt et des carbures. Cette simulation est également l'occasion d'évaluer la contribution du mécanisme d'Orowan. Ces derniers justifient environ le quart de la contrainte d'écoulement. La majeure portion de l'écoulement plastique de la ferrite des aciers de cuve est donc induite par les interactions entre systèmes de glissement.

---

**Bibliographie**

- [Ardell 1985] A. J. Ardell, Metall. Trans. **16A**, 2131 (1985).
- [Bacon *et al.* 1973] D. J. Bacon, U. F. Kocks, R. O. Scattergood, Phil. Mag. **28**,1241 (1973).
- [Bhadeshia 2000] H. K. D. H. Bhadeshia dans “Bainite in steel”, IOM communications ltd. (2001).
- [Brown et Ham 1971] dans A. Kelly and R.B. Nicholson, éditeurs, Strengthening Methods in Solids, chapter 2, pages 9–135. Applied Science Publishers, Barking, Essex (UK), 1971.
- [Bulatov *et al.* 2001] V.V. Bulatov, M. Tang, H.M. Zbib, MRS Bulletin (2001).
- [Büttner *et al.* 1986] N. Büttner, K. – D. Fusenig, E. Nembach, Acta Metall. **35**, 845 (1987).
- [Carassou, 2000] S. Carassou, Thèse de doctorat de l’Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris (2000).
- [Chaussidon 2007] J. Chaussidon, Thèse de doctorat de l’Institut National Polytechnique de Grenoble (2007).
- [De Sansal 2007] C. De Sansal, Thèse de doctorat de l’Ecole Centrale Paris (2007).
- [Devincre *et al.* 2006] B. Devincre, L. Kubin a, T. Hoc, Scripta Mat. **54**, 741 (2006).
- [Fisher *et al.* 1953] J. C. Fisher, E. W. Hart, R. H. Pry, Acta Met. **1**, 336 (1953).
- [Foreman 1973] A.J.E. Foreman, Phil. Mag. **15**, 1011 (1967).
- [Foreman et Makin 1966] A. J. E. Foreman, M. J. Makin, Phil. Mag. **13**, 911 (1966).
- [Foreman et Makin 1967] A. J. E. Foreman, M. J. Makin, Can. J. Phys. **45**, 511 (1967).
- [Franciosi *et al.* 1981] P. Franciosi, M. Berveiller and A. Zaoui, Acta Metall. **28**, 273 (1981).
- [Friedel 1964] J. Friedel, dans Dislocations, Pergamon Press, Oxford (1964).
- [Gourgues *et al.* 2001] A.-F. Gourgues, H. M. Flower, T. C. Lindley, Mater. Sci. & Tech. **16**, 26 (2001).
- [Haušild 2002] P. Haušild, Thèse de doctorat de l’Ecole Centrale Paris (2002).
- [Hausild, 2002] P. Hausild, Thèse de doctorat de l’Ecole Centrale Paris (2002).
- [Hirsch et Humphrey 1969] P. B. Hirsch, F. J. Humphreys, dans « The Physics of Strength and Plasticity », ed. A. S. Argon, M.I.T. Press (1969).
- [Hoc *et al.* 2004] T. Hoc, B. Devincre, L.P. Kubin 25th Riso International Symposium on Materials Science 43, (2004).
- [Karlik 2002] M. Karlik, rapport de Czech Technical University in Prague V-KMAT-516/02 (2002).
- [Kocks 1967] U. F. Kocks, Can. J. Phys. **45**, 737 (1967).
- [Kocks 1977] U. F. Kocks, Mat. Sci. Eng. **27**, 291 (1977).

- [Kocks *et al.* 1975] U. F. Kocks, A. S. Argon, M. F. Ashby, *Prog. Mater. Sci.* **19**, 1 (1975).
- [Kocks et Mecking 2003] U.F. Kocks and H. Mecking, *Prog. Mat. Sci.* **48**, 171 (2003).
- [Koppenaar et Kuhlmann-Wilsdorf 1964] T. J. Koppenaar, D. Kuhlmann-Wilsdorf, *Apl. Phys. Lett.* **4**, 59 (1964).
- [Kubin *et al.* 2006] L. P. Kubin, B. Devincre, T. Hoc, *Phil. Mag.* **86**, 4023 (2006).
- [Labusch 1970] R. Labusch, *Phys. Stat. Sol.* **41**, 659 (1970).
- [Lee *et al.* 2002] S. Lee, S. Kim, B. Hwang, B. S. Lee, C. G. Lee, *Acta Mater.* **50**, 4755 (2002).
- [Lefebvre *et al.* 2006] S. Lefebvre, B. Devincre, T. Hoc, *J. Mech. Phys. Sol.* **55**, 788 (2007).
- [Mangen *et al.* 1988] W. Mangen, E. Nembach, *Acta Metall.* **37**, 1451 (1989).
- [Mohles 2001a] V. Mohles, *Mat. Sci. Eng.* **A309-310**, 265 (2001).
- [Mohles 2001b] V. Mohles, *Phil. Mag. A* **81**, 971 (2001).
- [Mohles 2003] V. Mohles, *Phil. Mag. Letters* **83**, 9 (2003).
- [Mohles 2004] V. Mohles, *Mat. Sci. Eng.* **A365**, 144 (2004).
- [Monnet 2006a] G. Monnet, *Phil. Mag.* **86**, 5927 (2006).
- [Monnet 2006b] G. Monnet, Observations réalisées au MEB au sein du Département MMC, EDF.
- [Nembach 1996] E. Nembach, dans "Particle strengthening of metals and alloys", New York, Wiley (1996).
- [Nembach et Chow 1978] E. Nembach, C. -K. Chow, *Mat. Sci. Eng.* **36**, 271 (1978).
- [Nembach et Martin 1980] E. Nembach, M. Martin, *Acta Metall.* **28**, 1069 (1980).
- [Orowan 1948] Symposium on Internal Stresses in Metals and Alloys (The Institut of Metals, London, 1948).
- [Ortner *et al.* 2003] S.R. Ortner, J. Duff, D.W. Beardsmore, rapport Serco Assurance SA/EIG/15234/R003.
- [Priester 1984] L. Priester, Les joints de grains dans les matériaux, école d'été Carry-le-rouet, les éditions de la physique (1984).
- [Reppich *et al.* 1986] B. Reppich, W. Kühlein, G. Meyer, D. Puppel, M. Schulz, G. Schumann, *Mat. Sci. Eng.* **83**, 45 (1986).
- [Robertson *et al.* 2007] C. F. Robertson, K. Ortlik, B. Marini, *J. Nucl. Mater.*, article sous presse (2007).
- [Shin *et al.* 2003] C. S. Shin, M. C. Fivel, M. Verdier, K. H. Oh, *Phil. Mag.* **83**, 3691 (2003).
- [Shin *et al.* 2005] C. S. Shin, M. C. Fivel, M. Verdier, C. Robertson, *Mat. Sci. Eng.* **A400-401**, 166 (2005).
- [Xiang *et al.* 2003] Y. Xiang, D. J. Srolovitz, L. T. Cheng, E. Weinan, *Acta Mat.* **52**, 1745

(2003).

[Yashiro *et al.* 2006] K. Yashiro, F. Kurose, Y. Nakashima, K. Kubo, Y. Tomita, H. M. Zbib,  
Int. J. Plast. **22**, 713 (2006).

[Zhu *et al.* 1999] A. W. Zhu, A. Csontos, E. A. Starke Jr., Acta Mater. **47**, 1713 (1999).



---

## CHAPITRE V. INFLUENCE DU GLISSEMENT DEVIÉ

---

---

<b>Introduction</b>	<b>139</b>
<b>V.1. Influence du glissement dévié sur le mécanisme de la forêt</b>	<b>140</b>
V.1.1. Revue bibliographique	140
V.1.2. Influence du glissement dévié sur un système de glissement isolé	142
V.1.3. Effet du glissement dévié sur le durcissement de la forêt	145
<b>Résumé</b>	<b>147</b>
<b>V.2. Le rôle du glissement dévié sur le durcissement associé aux carbures</b>	<b>147</b>
<b>Résumé</b>	<b>156</b>
<b>V.3. Vers un modèle rendant compte de l'ancrage des systèmes de glissement par la déviation</b>	<b>156</b>
V.3.1. L'effet durcissant du glissement dévié	157
V.3.2. Evolution des densités de dislocations	159
V.3.3. Validation : simulation du glissement simple avec glissement dévié	161
<b>Résumé</b>	<b>163</b>
<b>Bibliographie</b>	<b>164</b>

---

### Introduction

Un certain nombre d'observations expérimentales, présentées au premier chapitre indiquent que le glissement dévié est facile dans le fer. D'une part, à cause de la multiplicité des plans de déviation possibles qui offre plus d'échappatoire aux dislocations. D'autre part, le cœur des dislocations vis étant compact [Frederiksen et Jacobsen 2003, Domain et Monnet 2005], la déviation ne requiert pas de recombinaison préalable des partielles, mécanisme qui est coûteux en énergie. C'est pourquoi, il faut s'attendre à ce que l'activité du glissement dévié soit plus importante dans le fer que dans les matériaux CFC par exemple. Les observations des lignes de

glissement très sinueuses dans le fer témoignent d'ailleurs de cette activité, même à petite déformation [Taoka *et al.* 1964, Franciosi 1984]. Il est donc crucial de définir le rôle de ce mécanisme sur le comportement plastique des aciers de cuve, et ceci est l'objet de ce chapitre.

Dans le contexte de cette étude, les mécanismes de durcissement sont multiples et l'influence du glissement dévié peut être variable. Pour simplifier, nous étudierons de manière séparée son effet sur l'interaction avec la forêt pour débiter, et ensuite sur le mécanisme d'Orowan. Enfin, ce chapitre s'achèvera par la composition de tous les mécanismes en présence du glissement dévié.

## V.1. Influence du glissement dévié sur le mécanisme de la forêt

### V.1.1. Revue bibliographique

Hormis les considérations d'ordre général, il existe assez peu d'études qui ont cherché à définir de manière quantitative l'influence du Glissement Dévié (GD) des vis sur le mécanisme de la forêt. Elles portent d'ailleurs essentiellement sur les matériaux de structure CFC.

La déviation est avant tout considéré comme un mécanisme d'adoucissement [Friedel 1964, Hirsch et Lothe 1982], et ceci principalement pour deux raisons. D'une part, le GD peut être un mécanisme de contournement, permettant d'éviter des obstacles cristallographiques ou élastiques. La déformation plastique se poursuit alors sur un autre plan primaire, après une double déviation. D'autre part, le glissement dévié est souvent associé à la restauration mécanique ou dynamique. Il autorise une diminution qui peut s'avérer considérable de la densité stockée, le GD permet par exemple l'annihilation de dipôles attractifs. Cette restauration devient d'ailleurs significative au cours de la déformation plastique, égalant le stockage de dislocations immobiles en fin de stade III lors des essais traction de monocristaux (*cf.* [Keh 1964] pour le fer, ou la revue proposée dans [Kocks et Mecking 2003]).

L'arrivée des simulations à l'échelle mésoscopique a mis en avant un rôle inattendu du GD. Kubin et Devincere [Kubin et Devincere 1999] furent les premiers à montrer l'influence du glissement dévié sur le comportement en traction dans le cas de l'aluminium sollicité suivant un axe de haute symétrie [001]. Leurs résultats soulèvent deux aspects :

- La contrainte d'écoulement simulée est supérieure lorsque le glissement dévié est actif, dès le début de l'écoulement plastique. Ce durcissement supplémentaire est associé au fait que la déviation est équivalente à grandir la densité des systèmes colinéaires (de même vecteur de Burgers que le primaire), et favorise la formation de débris, des super-crans, peu mobiles qui affectent le mouvement des dislocations primaires [Devincere *et al.* 2007]. A ceci s'ajoute l'interaction colinéaire des crans avec d'autres dislocations

primaires glissant sur des plans parallèles, qui est de loin la réaction de la forêt la plus durcissante, comme cela a été montré au chapitre III (*cf.* [Madec et Kubin 2004, Devincere *et al.* 2006])

- Kubin et Devincere [Kubin et Devincere 1999] constatent également que la microstructure de dislocations en présence du GD, présente une organisation plus marquée. Les annihilations et les crans colinéaires induits par le GD, ancrent en effet les dislocations dans les murs des cellules en formation. Les concentrations de contraintes qui existent au sein des parois favorisent d'ailleurs la déviation.

Kubin et Devincere [Kubin et Devincere 1999] suggèrent que cet effet durcissant est particulièrement visible aux petites déformations atteintes par les simulations de DD. Tandis que pour de plus grandes déformations, la densité primaire est telle que la déviation conduit plus probablement à des annihilations entre les lignes de dislocations. Et par conséquent elle réduit la densité de dislocations stockée. Le GD présente donc deux effets opposés, qui sont en compétition au cours de la déformation.

Ces résultats seront confirmés par d'autres travaux qui suivirent [Madec *et al.* 2002, Hoc *et al.* 2004, Devincere *et al.* 2007]. Comme nous l'avons déjà évoqué au chapitre III, Hoc *et col.* [Hoc *et al.* 2004] montrent que le durcissement supplémentaire en glissement simple associé au GD d'origine mécanique a permis de correctement reproduire l'écroûissage du stade I des courbes de déformation des CFC, ainsi que les microstructures qui lui sont associées.

Le rôle influent joué par le GD sur l'organisation des dislocations fut observé par la suite au cours de chargements plus complexes [Déprés *et al.* 2004, Weygand et Gumbsch 2005]. Dans le cadre de la compréhension du comportement en fatigue, Déprés *et al.* [Déprés *et al.* 2004] mettent en évidence par DD, le rôle du GD sur la formation de bande de glissement persistante. Plus précisément, la déviation permet la nucléation de nouveaux empilements de part et d'autre d'un premier. Il est intéressant de noter que la déviation ne se produit qu'après l'accumulation d'un certain nombre de dislocations dans les empilements. Les super-crans et les annihilations colinéaires permettent ensuite la fixation des bandes de glissement et leur épaissement.

Kubin *et al.* [Kubin *et al.* 2006] ont démontré récemment l'influence de la direction de sollicitation sur l'activité du GD, qui modifie la contribution du chargement appliqué sur les systèmes déviés. Ce point a notamment permis d'expliquer la faible sensibilité à la restauration dynamique observée dans les directions  $\langle 111 \rangle$  des CFC. En effet, le GD est dans cette direction de traction plus difficile que dans les autres directions de glissement multiples.

Une des grandes difficultés de l'étude du GD à l'échelle mésoscopique, réside dans la définition d'un critère de déviation réaliste. Nous avons évoqué ce problème dans le cas particulier du fer au cours du premier chapitre. Mais ce problème existe également concernant les matériaux de structure CFC. Beaucoup d'efforts ont été apportés, notamment à l'échelle

atomique, pour définir l'énergie d'activation nécessaire à la constriction préalable des partielles avant la déviation. Püschl propose une revue des différents traitements du GD dans [Püschl 2002]. Rasmussen *et al.* [Rasmussen *et al.* 1997] ont choisi une démarche originale pour définir l'énergie d'activation du GD dans le cuivre. A l'aide de simulations atomiques leur permettant de rendre compte des propriétés de cœurs des dislocations, ils explorent différentes configurations dans le but de définir le chemin d'énergie minimum. Dans ce contexte, il faut souligner l'un des rares travaux qui assure le lien entre les échelles atomique et mésoscopique. Cette démarche proposée par Rhee *et al.* [Rhee *et al.* 1998], met en œuvre dans des simulations de DD, un critère de déviation défini à partir des résultats de simulations de Monte Carlo.

### V.1.2. Influence du glissement dévié sur un système de glissement isolé

Les deux chapitres précédents ont introduit des simulations modèles, qui se sont montrées particulièrement utiles pour l'étude de la forêt ou du mécanisme d'Orowan. Elles sont reprises ici dans le but d'étudier le rôle du GD. Pour cela nous allons procéder par étapes. En premier lieu, nous allons définir l'influence du GD sur un seul système de glissement. En ce sens, la simulation de l'interaction dipolaire est reprise du chapitre III. Dans un deuxième temps, l'influence des interactions mises en jeu avec la forêt sera étudiée par le biais des simulations de l'écroutissage latent.

Pour rappel, les simulations de l'interaction dipolaire portent sur une configuration du système primaire d'une densité de  $10^{13} \text{ m}^{-2}$ , qui est construite à partir de sources de  $2 \mu\text{m}$ , distribuée aléatoirement en caractère et dans le volume de simulation. Ce dernier présente un côté de  $2 \mu\text{m}$ . La direction de sollicitation apparaît comme un des paramètres clefs dans l'activité du GD [Escaig 1967, Kubin *et al.* 2005], modifiant les valeurs relatives des facteurs de Schmid sur les plans primaire et déviés et ainsi favorise la déviation des vis. C'est pourquoi, nous allons chercher dans un premier temps à quantifier son effet. De ce fait, deux cas limites sont étudiés. Ils correspondent à des conditions de glissement distinctes :

- le premier choix se porte vers un axe de sollicitation correspondant à un glissement simple. Le facteur de Schmid sur le système primaire est très supérieur à celui des deux systèmes déviés. Il s'agit d'une direction du type  $\langle 1511 \rangle$  qui se situe au milieu du triangle standard. Le facteur de Schmid du système primaire  $m_l$  prend sa valeur maximale de 0,5 tandis que les facteurs de Schmid des systèmes déviés  $m_d$  sont égaux et valent 0,25. Ce chargement sera nommé Glissement Simple (GS).
- La seconde direction correspond à un axe de haute symétrie de la structure CC, pour lequel le Glissement est Multiple (GM). Le facteur de Schmid sur un des deux systèmes déviés est égal à celui sur le système primaire. L'activité du glissement dévié est très favorisée par le chargement appliqué. Tandis que le second système dévié présente un

facteur de Schmid nul.

**Influence de l'activité du glissement dévié**

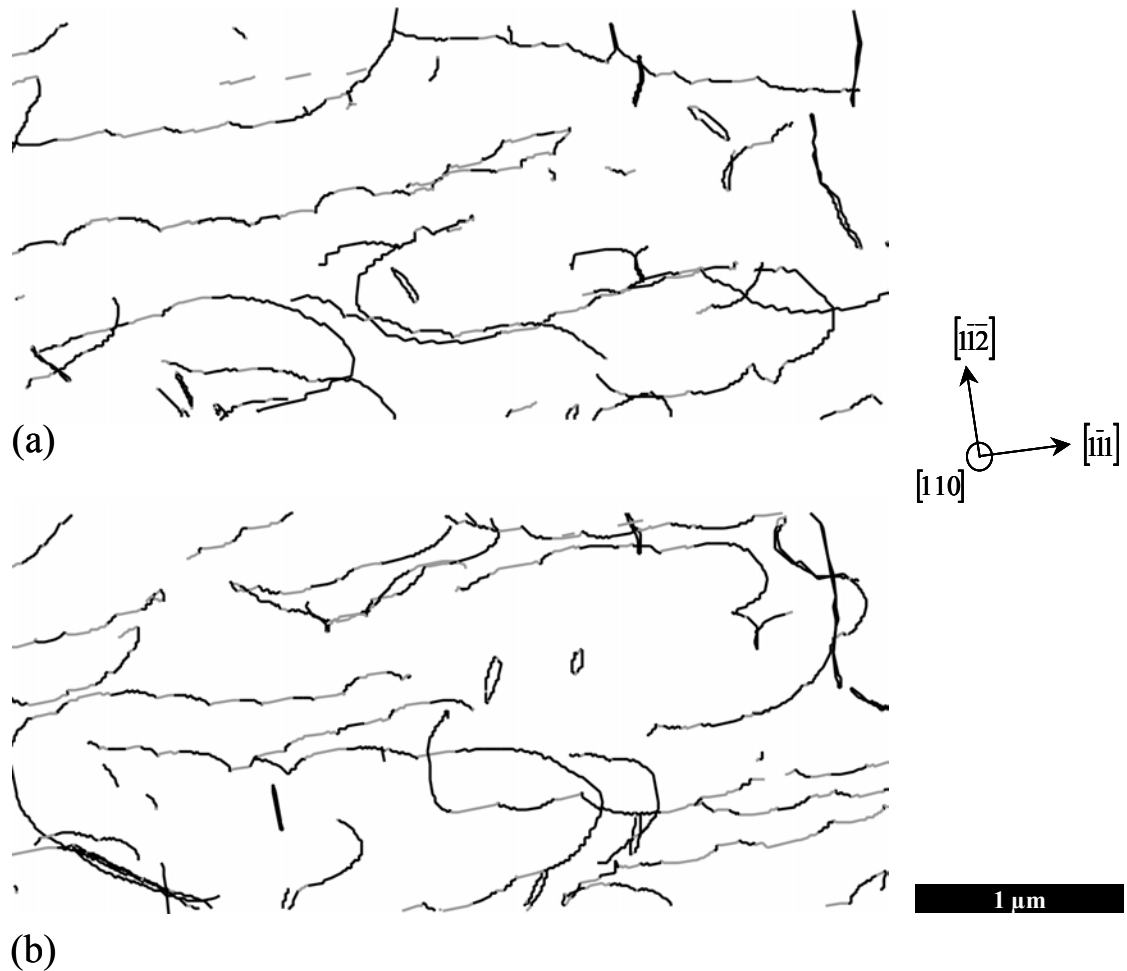


Figure V.1. Microstructures de dislocations simulées obtenues sous chargement pour  $\gamma = 0,6 \%$ . La lame mince est orientée suivant le plan du système primaire, et présente une épaisseur de  $0,15 \mu\text{m}$ . (a) condition de GS et (b) GM. Les dislocations grises appartiennent à un des systèmes déviés.

La sollicitation est réalisée à vitesse de déformation imposée, dont la valeur de  $2000 \text{ s}^{-1}$  est reprise du chapitre III. Des tests préliminaires ont permis de vérifier que les résultats ne dépendent pas de façon notable de la vitesse de déformation, malgré l'introduction du GD.

La figure V.1 montre l'influence du GD sur les microstructures de dislocations simulées. Pour simplifier, les résultats obtenus sans GD, sont nommés glissement idéal puisque le déplacement des dislocations reste dans un plan unique. Tout d'abord, les microstructures obtenues avec du GD actif présentent des similitudes à la fois avec celle obtenue avec l'auto-interaction, de part la formation de quelques dipôles, mais aussi avec la microstructure associée

à l'interaction colinéaire, à cause de la présence de nombreux crans colinéaires et de boucles débris issus de l'annihilation. Les deux configurations, en GS et GM, font apparaître par endroit de longues dislocations vis, qui appartiennent en alternance au plan primaire et à un dévié. Comme les parties déviées ne sont pas suffisamment longues pour être activées, elles ancrent les dislocations primaires. Dans ces conditions, la déformation plastique est assurée préférentiellement par les dislocations de caractères non vis. La comparaison entre les deux microstructures montre que les sections déviées sont plus nombreuses et plus longues quand le GD est plus actif (en GM). Les débris semblent un peu plus nombreux. Les sections qui ont dévié ne sont mobiles que suivant la direction commune au plan initial et celui de déviation, c'est-à-dire la direction vis. Les sections déviées affectent donc de manière différente la dislocation primaire d'où elles sont issues, en fonction de son caractère. Une dislocation initialement vis, se déplace suivant la perpendiculaire du vecteur de Burgers, les sections déviées constituent alors des points d'ancrage relativement forts. Dans le cas d'une dislocation initialement coin ou mixte, le déplacement a plutôt tendance à traîner et/ou allonger la section qui a dévié.

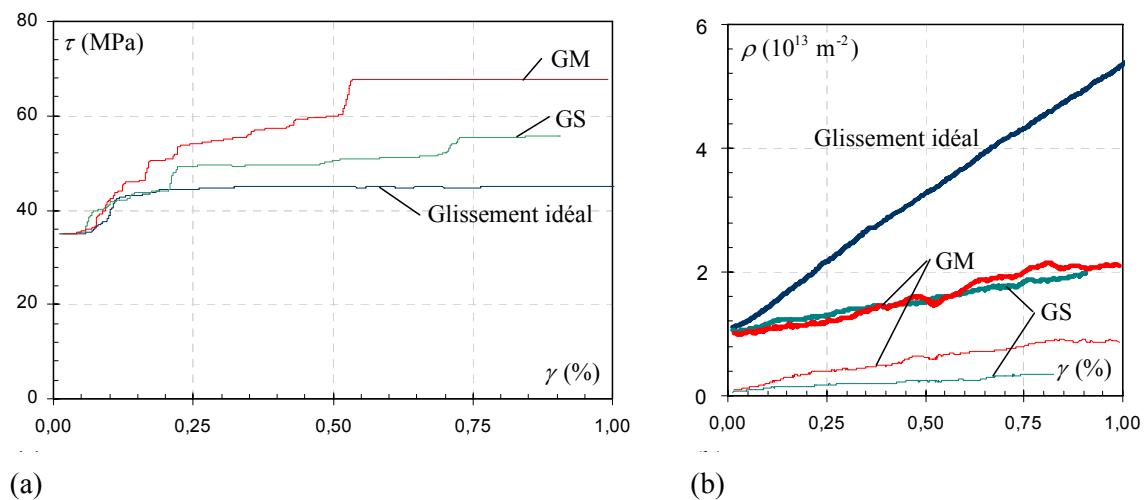


Figure V.2. (a) Influence de l'activité du GD sur les courbes contrainte-déformation obtenues pour la simulation de l'interaction dipolaire, en condition de glissement idéal et suivant l'activité du GD. (b) Evolution des densités primaire (traits épais) et déviée (traits fins) au cours de ces mêmes simulations.

La figure V.2.a qui reporte les différentes courbes de déformation, démontre que le glissement dévié agit comme un mécanisme de durcissement. Le durcissement supplémentaire augmente d'ailleurs avec l'activité du glissement dévié, qui est plus importante dans le cas du GM. En fin de simulation pour  $\gamma \approx 1$  %, la différence avec la contrainte d'écoulement observée sans GD est de 10 MPa dans le cas du GS, et de près de 25 MPa en GM. Avec GD, l'allure de la courbe de déformation n'est plus un plateau, et présente un écrouissage assez net. Les

évolutions des densités primaires et déviées sont reportées dans la figure V.2.b en fonction du cisaillement. Tout d'abord, les densités de dislocations déviées présentent une évolution quasi-linéaire, à l'image de ce qui a déjà été observé par Hoc *et al.* [Hoc *et al.* 2004]. Il est donc possible de définir un taux de stockage constant à partir de cette courbe. Comme cela était prévisible, la densité déviée est plus importante dans le cas du GM. Avec GD, l'évolution des densités primaire reste linéaire. Il est intéressant de noter l'écart significatif qui existe entre la densité primaires sans et avec le GD. Cela est évidemment dû aux intersections entre le système primaire et les sections déviées, qui conduisent à des annihilations colinéaires, et réduisent ainsi les densités de dislocations des deux systèmes. Toutefois, il est surprenant de constater l'égalité des taux de stockage des densités primaires obtenue en GS et en GM, malgré des différences significatives entre les densités déviées. Les annihilations plus nombreuses dans le cas du GM, sont donc équilibrées par un stockage plus grand, certainement sous forme de boucles débris plus nombreuses.

En résumé, l'activation du GD lors de simulations modèles qui ne portent que sur un unique système de glissement, conduit à un fort durcissement. Ce durcissement vient de la formation de nombreuses boucles débris ou super-crans colinéaires, conséquents à la déviation. Ces débris restreignent fortement le glissement du système mobile mais ne contribuent pas à la déformation plastique. Cet effet durcissant fort est cohérent avec le fait que le mécanisme mis en jeu est la réaction colinéaire (*cf.* Chapitre III). L'augmentation quasi-linéaire de la densité de dislocations sur un système dévié alors que celui-ci ne génère pas de déformation plastique est un paradoxe sur lequel nous reviendrons plus loin.

### V.1.3. Effet du glissement dévié sur le durcissement de la forêt

Le glissement dévié des vis est un mécanisme local. Son activité est associée aux champs de contraintes locaux, et par conséquent à la configuration des dislocations environnantes. Il est donc primordial d'étudier l'activité du GD selon la nature des interactions entre le système primaire et de la forêt. Pour cela, une solution simple consiste à reprendre les simulations de l'écroissage latent présentées au chapitre III, dans lesquelles le glissement dévié est à présent activé. Afin de limiter le nombre de simulations, nous nous limitons à l'étude de trois réactions : (i) l'annihilation colinéaire qui est spécifique, (ii) la jonctions mixte symétrique, qui est une jonction forte, (iii) et enfin la jonction mixte asymétrique, qui est une jonction faible (*cf.* chapitre III). Les conditions et configurations initiales des simulations sont reprises du chapitre III. Le choix concernant l'axe de sollicitation se porte un axe  $\langle 1\ 5\ 11 \rangle$ , qui correspond à du GS. Par conséquent, le facteur de Schmid sur les deux systèmes déviés  $m_d$  est égal à  $0,5 m_l$ .

Les courbes de déformations obtenues pour les différentes interactions sont présentées dans la figure V.3.a. La comparaison avec les courbes obtenues dans les mêmes conditions sans

glissement dévié (*cf.* chapitre III) montre deux effets différents. D'un côté les nouvelles courbes concernant les jonctions présente à nouveau un écrouissage clairement visible et le niveau de contrainte atteint est supérieur en fin de simulation de l'ordre de 20 MPa à celui sans GD. D'un autre côté, l'allure de la courbe associée aux interactions colinéaires est proche d'un plateau. La contrainte d'écoulement est, somme toute, assez proche de celle obtenue sans GD. Ceci s'explique très certainement par le fait que la proportion que représente la densité de débris colinéaires dus au GD, reste petite en comparaison de la densité initiale de forêt colinéaire de  $2 \cdot 10^{13} \text{ m}^{-2}$ .

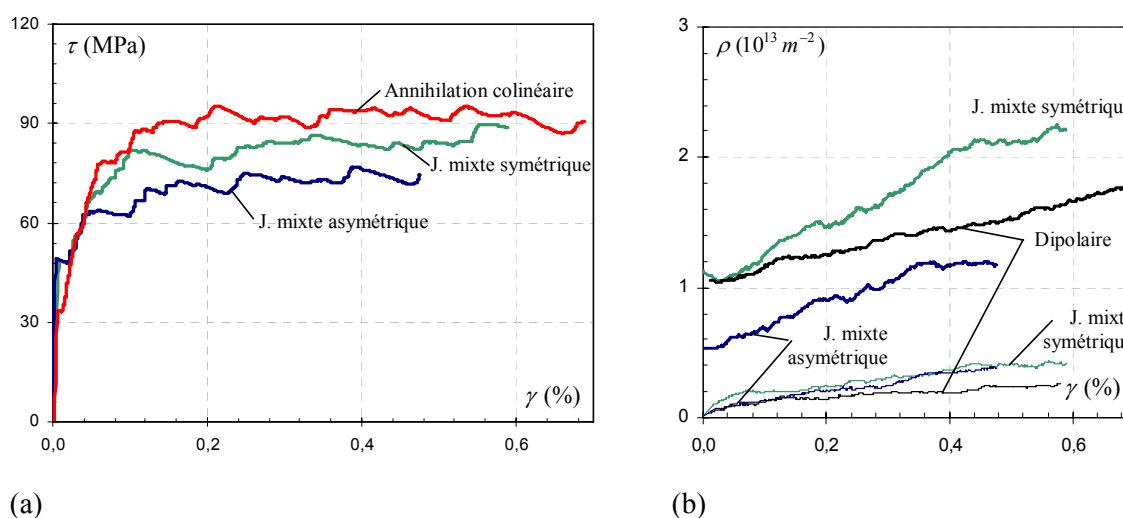


Figure V.3. (a) Courbes de déformation obtenues au cours des simulations de l'écrouissage latent, avec glissement dévié. (b) Evolution des densités primaires (en gras), et déviées (en traits fins) au cours des mêmes simulations.

Comme le montre la figure V.3.b, les densités primaires et déviées évoluent linéairement au cours de la déformation. Dans le cas de l'interaction colinéaire, il n'est pas aisé de définir la densité associée aux événements de déviation, puisque celle-ci est de même nature que le système de la forêt. Pour comparaison, les résultats obtenus concernant l'auto-interaction sont également reportés dans la figure V.3.b. Il est intéressant de noter que l'activité du glissement dévié est fonction de la force de l'interaction entre dislocations, mais comme nous l'avons discuté dans la précédente section, les déviations restent trop courtes pour s'activer et produire un glissement sur les systèmes déviés. Le résultat majeur qui ressort de ces courbes, est que la densité de débris et crans colinéaires issus de la déviation est plus importante, environ le double, dans le cas des réactions fortes en comparaison de l'interaction dipolaire. Nous quantifierons ce dernier point un peu plus loin.



## Résumé

---

L'influence du glissement dévié sur le mécanisme de la forêt est étudiée au travers de simulations modèles simples, afin de bien comprendre son rôle. Tout d'abord, l'activité du GD est variée au cours de simulation de l'auto-interaction via le choix de la direction de sollicitation, modifiant la cission appliquée sur les plans de déviation. Les résultats montrent que (i) à faible déformation, le GD agit comme un mécanisme de durcissement de par la création de débris ou super-crans déviés qui constituent des obstacles forts, (ii) la densité de ces débris, et donc le durcissement associé, augmentent avec l'activité du GD.

Dans un second temps, le rôle du glissement dévié est regardé en modifiant la nature des interactions entre le système primaire et les systèmes de la forêt. Pour cela, nous avons repris les simulations de l'écroissage latent utilisées au chapitre III. Les résultats montrent assez clairement que la densité de débris issus de la déviation augmente avec la force des interactions mises en jeu.

---

## V.2. Le rôle du glissement dévié sur le durcissement associé aux carbures

Il existe très peu d'études portant sur l'influence du glissement dévié sur le durcissement par précipitation. Xiang et ses collaborateurs [Xiang *et al.* 2003] ont analysé à l'aide de simulations DD, les différentes solutions offertes à une dislocation pour passer une particule impénétrable, et en présence d'une force d'interaction entre le précipité et la dislocation. Leurs travaux sont dédiés aux matériaux de structure CC dans l'hypothèse d'un glissement qui ne serait pas cristallographique et de coût énergétique nul. La dislocation peut alors changer librement de direction de glissement. Et par conséquent la déviation des vis est très aisée. Leurs simulations montrent que le glissement dévié peut avoir deux conséquences distinctes. Soit permettre l'annihilation de tout ou partie des boucles laissées après le passage de la dislocation. Soit modifier le plan d'appartenance de la boucle d'Orowan, si la force d'interaction exercée par la particule est suffisante. D'autre part, Shin et ses collaborateurs [Shin *et al.* 2003] reproduisent à l'aide de simulations de DD, le fait expérimental du contournement d'une particule par une double déviation. Leurs simulations mettent également en jeu une force d'interaction entre la particule et la dislocation. Ces auteurs suggèrent enfin que ce mécanisme de double déviation est favorisé s'il existe déjà des boucles d'Orowan autour du précipité, réduisant ainsi le stockage dû à des précipités. Ce fait avait également été suggéré par Brown et Ham [Brown et Ham 1971].

Néanmoins, les travaux précédents ne fournissent aucune information au sujet des contraintes qui sont mises en jeu. En outre, ces simulations exploitent des configurations géométriques simplifiées, qui permettent de réduire le nombre de paramètres qui interviennent

et favorisent la compréhension du mécanisme de contournement. Mais ces situations modèles n'autorisent aucun parallèle avec le rôle que peut jouer le GD au sein d'une configuration complexe de dislocations et de particules.

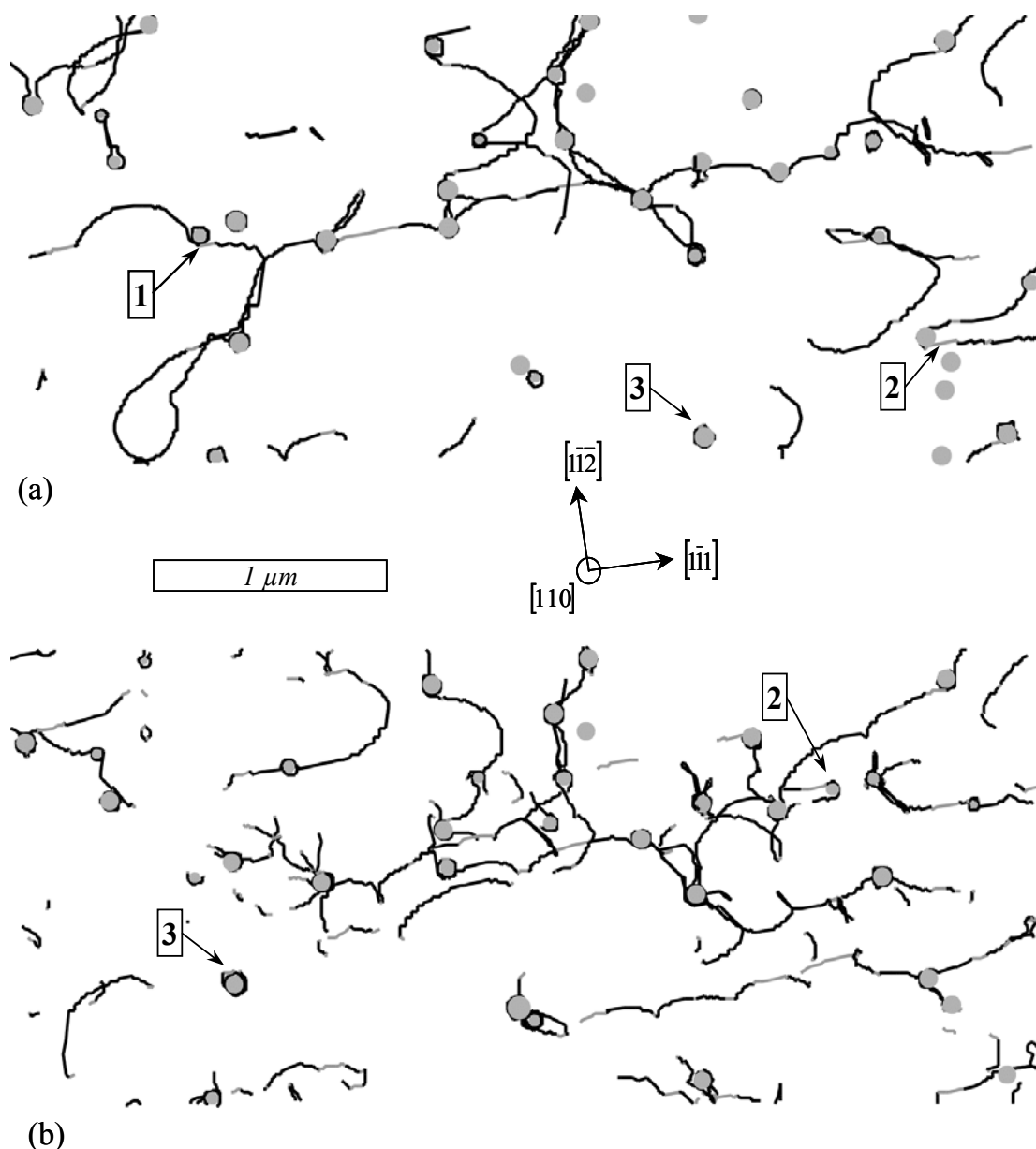


Figure V.4. Microstructure de dislocations obtenues lors des simulations de l'interaction entre une distribution de dislocations d'un système primaire avec une distribution de carbures. Les sections de dislocations qui ont dévié dans un autre plan sont en gris. Les carbures sont représentés par les disques gris. Le plan de la figure coïncide avec le plan de glissement primaire. La lame présente une épaisseur de  $0,1 \mu\text{m}$  est à été obtenue pour  $\gamma = 0,5 \%$ . Les deux microstructures diffèrent par leur direction de chargement, elle correspond à un GS (a) ou un GM (b).

C'est pour discuter ce point, que des simulations de l'auto-interaction sont réalisées à présent. Elles portent sur une distribution à la fois de dislocations et de carbures, le glissement dévié étant à présent actif. La microstructure initiale de dislocations ainsi que la distribution de carbures sont reprises des simulations du chapitre IV dans le but de faciliter la comparaison ultérieure. La direction de sollicitation est à nouveau variée afin d'étudier l'influence de l'activité du GD sur les résultats.

Deux microstructures simulées sont données en figure V.4, pour les deux conditions de GS et GM. Un certain nombre d'observations réalisées au début du chapitre se retrouvent ici. Les sections qui ont dévié constituent des obstacles aux autres dislocations du système primaire. L'annihilation qui en résulte, sectionne les dislocations et conduit à l'apparition de boucles débris. A cela s'ajoute un certain nombre d'observations nouvelles associées à la présence des carbures. Elles sont repérées par un numéro dans la figure V.4.

1. Il est courant de voir se former une déviation sur une dislocation qui se rapproche d'un carbure dès lors qu'il est encerclé par des boucles d'Orowan. La déviation s'opère généralement sur une distance assez faible, de l'ordre du diamètre des carbures. Certains carbures, s'ils sont déjà encerclés de boucles d'Orowan, sont parfois contournés par le mécanisme de double déviation. Mais ceci concerne principalement le GM.
2. Le contournement d'un carbure par une dislocation initialement coin se fait parfois d'une manière originale. Une déviation se produit sur un des dipôles qui se forme derrière le précipité. La déviation empêche la formation de la boucle et la libération de la dislocation. Le reste de la dislocation continue d'avancer et allonge la partie déviée. L'annihilation finit par se produire mais à une distance bien supérieure au diamètre du précipité.
3. Quelques boucles d'Orowan présentent une partie qui a dévié, seulement lorsque le carbure est entouré par d'autres boucles. L'annihilation d'une boucle à l'aide du mécanisme de GD n'a pas été observée.

Les sections déviées sont plus nombreuses et généralement plus longues lorsque le chargement correspond au GM. Elles sont également plus courbées dans le plan de déviation, et parfois atteignent la longueur suffisante pour s'activer et induire une déformation plastique non négligeable sur le système dévié. Ceci donne lieu à une succession de réactions avec les dislocations du système primaire.

La figure V.5 reporte l'évolution des courbes de déformation en fonction de la présence ou non des carbures, en présence du glissement dévié. Pour rappel, la condition de GS et GM correspondent respectivement à  $m_d = 0,5 m_1$  pour les deux systèmes déviés et  $m_d = m_1$  pour l'un des systèmes déviés et  $m_d = 0$  pour le second. Comme nous l'avons déjà vu, l'activité du GD est

amplifiée avec l'augmentation du facteur de Schmid suivant le plan de déviation. Un effet durcissant lié à la formation de débris est à nouveau retrouvé. Par contre il reste à savoir si le durcissement associé aux carbures est affecté par la présence de ces débris. Pour cela l'incrément de contrainte  $\Delta\tau_p$  associé aux carbures est introduit comme la différence entre les contraintes d'écoulement avec et sans la distribution de carbure. Sa définition est donnée en exemple dans la figure V.5. La comparaison avec les courbes données en Figure IV.8 sans glissement dévié, montre que  $\Delta\tau_p$  passe de 25 MPa pour  $\gamma = 0,2 \%$ , à 30 MPa en GS et s'approche de 40 MPa pour le chargement correspondant au GM. Ce qui représente une augmentation de plus de 50 %. Autrement dit, la formation de boucles d'Orowan dues à la présence de carbures favorisent la déviation et conduit ainsi à des ancrages colinéaires plus nombreux. La comparaison des courbes obtenues en GS et GM, indique que cet effet est également amplifié par l'augmentation de l'activité du GD.

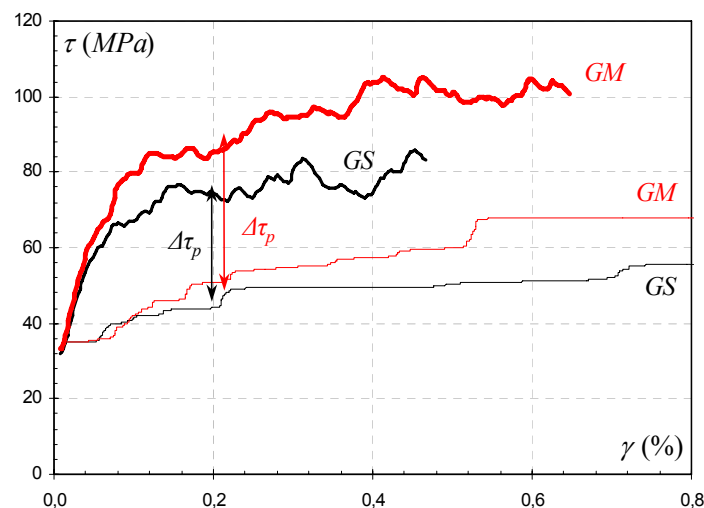


Figure V.5. Courbes de déformation simulée pour les chargements correspondant au GS ou GM, la déviation étant activée. Les courbes en traits fins correspondent aux simulations portant sur l'auto-interaction seule. Les courbes qui sont associées à l'interaction avec les carbures sont en traits épais.

### Loi d'évolution des densités de dislocations

Les évolutions des densités de dislocations primaires et des systèmes déviés au cours de la déformation, sont données en figure V.6, pour les différentes activités du GD (*i.e.* GS et GM). A nouveau, les densités évoluent toutes de manière linéaire avec la déformation et seront simplement décrites au moyen d'un taux de stockage constant. L'introduction du GD diminue la densité du système primaire, de part les annihilations avec les crans déviés. Par contre la densité primaire sans la présence des carbures (*cf.* figure V.3.b) ne semblait pas affectée par la

modulation de l'activité du glissement dévié. Tandis que la figure V.6 montre une légère différence entre les courbes correspondant au GS et au GM.

Le tableau V.1 regroupe les taux de stockage des densités primaires simulées suivant l'activité du GD et de la présence des carbures. Le taux de stockage de  $3 \cdot 10^{13} \text{ m}^{-2}/\%$  (cf. chapitre IV), associé à la formation de boucles autour des carbures est retrouvé. De ce fait le stockage de dislocations sous forme de boucles ne semble pas significativement affecté par le GD, ce qui est en accord avec les observations faites précédemment.

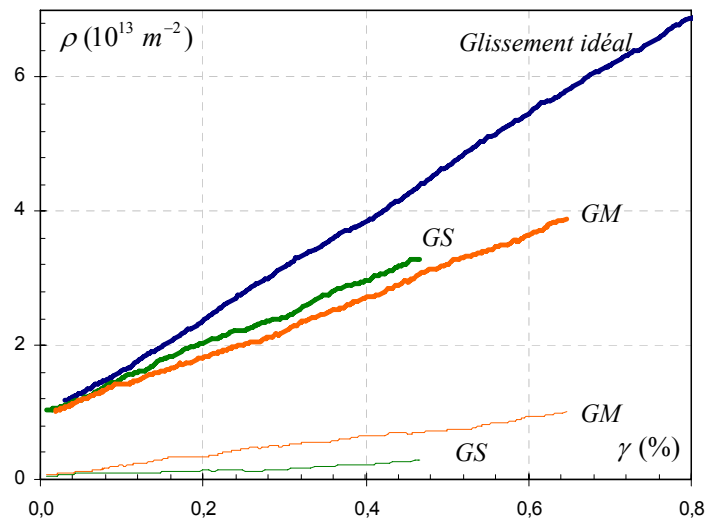


Figure V.6. Evolutions des densités primaires (en traits épais) et déviées (en traits fins) avec le cisaillement, pour différentes activités du glissement dévié.

Tableau V.1. Taux de stockage de la densité primaire en fonction de l'activité du glissement dévié et de la présence de carbures.

	Taux de stockage primaire ( $10^{13} \text{ m}^{-2}$ )		
	Sans carbure	Avec carbures	Différences
Glissement idéal	4,3	7,3	3
$m_d = 0,5 m_1$	1,2	4,8	3,6
$m_d = m_1$	1,1	4,4	3,3

### Discussion sur l'effet durcissant constaté en présence du glissement dévié

Il est possible de regrouper les observations faites dans la section précédente, de la manière suivante :

- D'une part, il existe de nombreux événements associés au glissement dévié qui rendent plus difficile le contournement des carbures. La présence de ces derniers introduit des

gradients de contraintes qui favorisent la déviation, par exemple, sur un des dipôles qui se forment lors du contournement par Orowan. La création de ces nouveaux super-crans est la source d'un ancrage supplémentaire aux dislocations primaires.

- D'autre part, les mécanismes adoucissants existent, mais sont peu nombreux. L'observation des microstructures simulées a montré que la longueur de déviation  $L_D$  devant les carbures est généralement faible, de l'ordre du diamètre des carbures et que la déviation requiert la présence de boucles d'Orowan. Les événements de doubles déviations sont peu nombreux. Une section qui a dévié a la possibilité de se propager, à la condition d'être activée à la manière d'une source. Or la contrainte pour courber une dislocation varie, en première approximation, comme l'inverse de sa longueur. Les dislocations les plus courtes se courbent donc plus difficilement. Or la distance entre particules  $L_I$  est généralement bien supérieure au diamètre des particules ou de la distance sur laquelle la déviation s'est produite (*cf.* figure V.7). Il sera donc généralement moins coûteux en terme de contrainte, de poursuivre la déformation plastique dans le plan initial. Ceci restreint donc le domaine de configurations pour lesquelles la déviation conduit à un adoucissement.

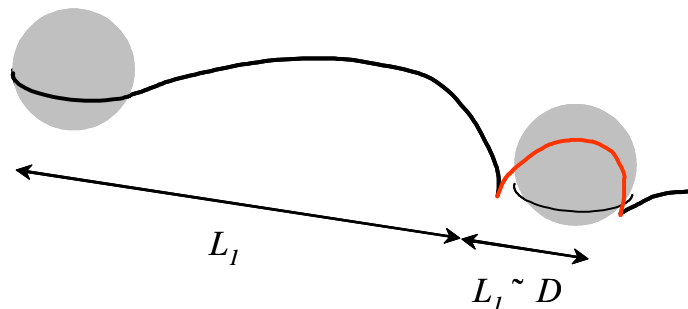


Figure V.7. Illustration de la compétition entre le développement de la déviation (en rouge) et la propagation de la dislocation dans le plan de glissement initial.

Afin de mieux comprendre la physique mise en œuvre au cours des simulations précédentes, nous allons considérer le cas simple de l'interaction entre une dislocation infinie et une rangée périodique de carbures. La seule différence avec ce qui a été réalisé dans le chapitre IV, réside dans l'introduction du glissement dévié. L'intérêt majeur de cette simulation modèle est de se rapprocher plus rapidement des configurations semblables à celles obtenues après de fortes déformations. La simulation porte sur une dislocation vis. Le diamètre des particules et la distance les séparant sont reprises des dimensions caractéristiques observées dans les aciers de cuve. La direction de chargement est prise de manière à ce que les facteurs de Schmid sur le système primaire et un des déviés soient identiques, cas le plus favorable à la déviation.

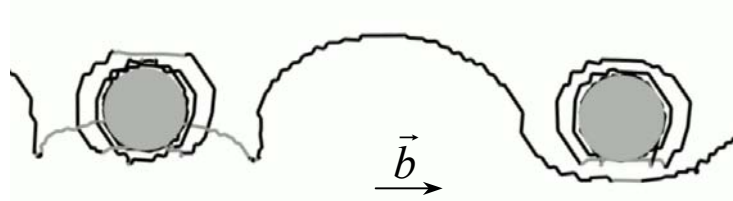


Figure V.8. Contournements d'une rangée périodique de particules à l'aide du glissement dévié. Les parties de dislocations qui ont changé de plan sont en gris. La déviation se produit devant les boucles encerclant les précipités.

Lors des premiers passages de la dislocation, le glissement dévié a plutôt tendance à s'opposer au mouvement de la dislocation, puisque de courtes sections déviées peu mobiles sont générées. Un peu plus tard, des parties vis le long des boucles d'Orowan dévient également, mais sur une distance trop courte pour que la boucle s'annihile. Après trois boucles d'Orowan accumulées, la partie de la dislocation qui s'approche face aux précipités dévie, et s'allonge suffisamment pour se courber et s'éloigne du plan primaire (*cf.* figure V.8). La déviation se propage ensuite le long de la ligne, et la rangée de précipités est contournée de cette manière. A partir de là, les dislocations suivantes contournent les précipités de façon identique et plus aucune boucle d'Orowan n'est ajoutée.

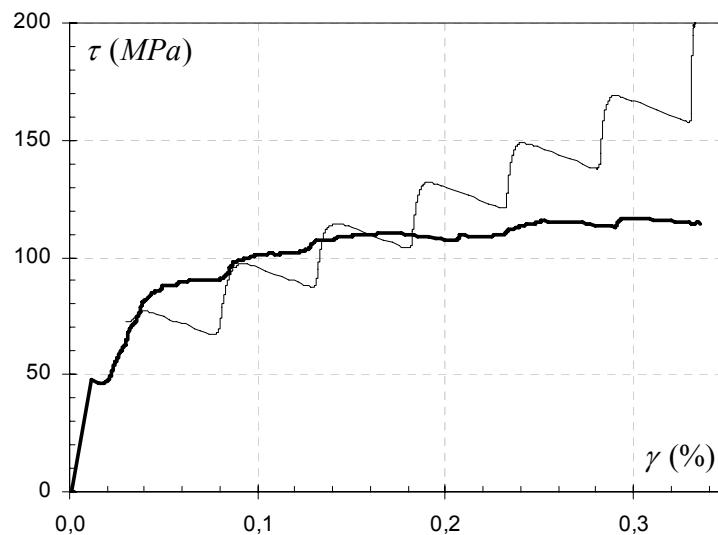


Figure V.9. Effet de l'activation du GD sur la contrainte d'écoulement nécessaire au passage d'une dislocation infinie au travers d'une rangée périodique de particules impénétrables. La courbe en trait épais correspond à l'activation du GD

La figure V.9 montre comment ce mécanisme se traduit en terme de contrainte. La courbe obtenue sans GD est rappelée. On retrouve dans la comparaison de ces courbes les deux effets

antagonistes du glissement dévié. Pour les premiers passages de la dislocation, la contrainte avec glissement dévié est supérieure de 5 à 10 MPa à celle obtenue sans autoriser la déviation. A partir du moment où trois boucles encerclent les précipités, la contrainte avec GD reste plus basse que sans déviation, et augmente plus lentement avec la déformation. L'effet adoucissant du glissement dévié est ainsi retrouvé. Par contre ces résultats démontrent que le contournement par déviation n'est autorisé qu'à la condition qu'il existe un champ de contraintes autour des précipités. Ce point avait été également suggéré par Shin et ses collaborateurs [Shin *et al.* 2003].

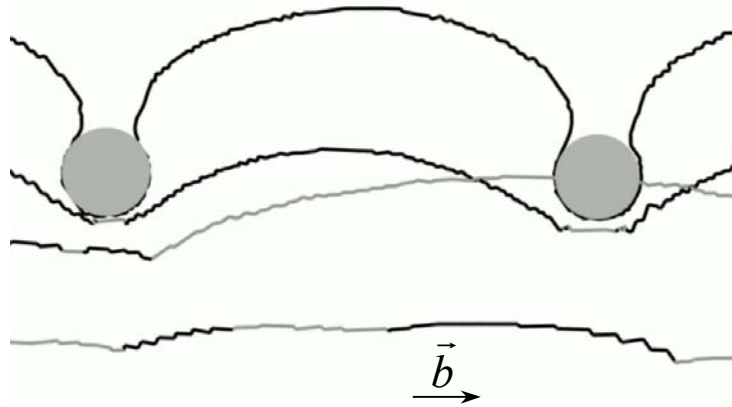


Figure V.10. Illustration du contournement de particules à l'aide du GD, lors de l'application d'un chargement constant de 55 MPa. La déviation est permise par l'empilement de dislocations devant la rangée d'obstacles.

Les observations présentées dans la section V.2, suggèrent aussi que le contournement des carbures peut être aidé par le comportement collectif des dislocations. L'exemple le plus classique, est celui de l'empilement de dislocations primaires devant une région dense de précipités. Les interactions que les dislocations exercent entre elles, aboutissent au contournement de carbures par l'une d'entre elles et cela sans apport de contrainte. Cette idée est reprise dans une seconde simulation modèle : pour un chargement fixe, des dislocations vis s'empilent devant une rangée de précipités jusqu'à permettre le passage de l'une d'entre elles. Les diamètres et distances entre carbures sont toujours celles caractéristiques des aciers de cuve. La contrainte appliquée est fixée à 55 MPa, ce qui est bien en dessous des 69 MPa nécessaire sans GD pour le passage d'une dislocation vis individuelle. Sans glissement dévié, le passage des carbures se produit après l'empilement de cinq dislocations, tandis qu'il en faut une de moins lorsque le GD est activé. Comme le montre la figure V.10, une section déviée se forme et se propage le long de la troisième dislocation empilée jusqu'à ce que cette dernière ait entièrement changé de plan. D'autres auteurs ont observé un mécanisme similaire dans le cas d'empilements devant des joints de grains [Déprés *et al.* 2004, de Sansal 2007] A nouveau, la



déviations permet de contourner plus facilement des carbures, et agit donc comme un mécanisme d'adoucissement.

En résumé, l'influence du glissement dévié sur le mécanisme d'Orowan est complexe, un peu à l'image de son rôle sur la forêt. Il se comporte comme un mécanisme de contournement à condition qu'il y ait une force motrice suffisante. Celle-ci peut être fournie par la force d'interaction avec les obstacles ou par les interactions avec les autres dislocations. Toutefois, la formation de sections déviées équivaut à l'introduction de nombreux débris, des super-craques, le long des lignes de dislocations primaires. À l'image de ce qui est suggéré concernant son rôle sur la forêt, il est vraisemblable que le GD se manifeste selon deux effets antagonistes. À petite déformation, l'activité de la déviation n'est pas suffisante pour participer à la déformation plastique. La densité issue de la déviation ne se présente que sous la forme de débris restreignant la mobilité des systèmes actifs. Tandis qu'à grande déformation et forte densité de dislocations, l'effet adoucissant prend le dessus. En effet, la plus forte densité de dislocations et de boucles augmente la « force motrice » pour la déviation. La déformation plastique sur les systèmes déviés devient notable et la probabilité que cette dernière s'achève par une annihilation avec le primaire est accrue.

La discussion ne serait pas complète sans aborder l'aspect quantitatif de nos simulations. Elles sont basées sur deux hypothèses majeures. Aucune force d'interaction entre les carbures et les dislocations n'est introduite. Et le critère de déviation est purement mécanique. Il correspond en quelque sorte au cas limite pour lequel la déviation est le plus favorable. Les forces locales telles que la force d'interaction entre particules et dislocations favorisent la déviation, comme le suggère Shin *et al.* [Shin *et al.* 2003]. Mais nos simulations montrent cependant que la déviation n'est pas si facile, malgré les conditions choisies ici qui sont très favorables. Ensuite, le critère de déviation facile, comme introduit dans nos simulations, conduit à la formation de nombreuses sections déviées de petite longueur qui ancrent plus ou moins les dislocations. Ces deux hypothèses de simulations maximisent donc l'effet durcissant du GD. Cet effet serait certainement atténué dans le cas des matériaux CFC, présentant un seul plan de déviation et ayant un coût énergétique associé à la recombinaison des parties.

Enfin le cas de précipités cisailables peut être discuté à la lumière des observations réalisées dans cette partie. Par opposition au mécanisme d'Orowan, il est suggéré que l'introduction d'une force d'interaction entre les précipités et les dislocations peut jouer un rôle important [Brown et Ham 1971]. Mais il s'agit évidemment d'une considération relative à la force de ce type d'obstacle. La prise en compte des différences élastiques entre un précipité cisailable et la matrice ne modifie que la force nécessaire aux dislocations pour le cisailier. Il demeure un obstacle faible. Nos simulations ont mis en évidence que le contournement par déviation nécessite la présence de contraintes locales importantes. En outre, ces obstacles qui sont

cisaillables n'induisent pas un stockage de dislocations aussi important que dans le cas des précipités impénétrables. De ce fait, il est vraisemblable que l'effet adoucissant du glissement dévié reste très limité dans le cas du durcissement structural induit par des particules cisaillables.

## Résumé

---

Deux effets antagonistes du glissement dévié sont retrouvés dans les simulations du durcissement par précipitation. D'une part, le GD affecte la mobilité des systèmes actifs par l'accumulation de super-crans ou boucles débris le long des dislocations. Et la formation de crans colinéaires qui conduit à une interaction très forte avec les autres dislocations du système primaire. D'autre part, le GD est aussi un mécanisme d'adoucissement permettant le contournement d'obstacles, et la diminution de la densité stockée. Ce second effet, qui est celui plus communément discuté, devient significatif préférentiellement aux plus fortes déformations ou pour de plus fortes densités de dislocations. Des simulations DD massives, qui ne portent que sur de petites déformations, vont plutôt mettre en avant l'effet durcissant.

L'effet adoucissant du GD est malgré tout retrouvé dans des simulations portant sur des configurations modèles. Ces résultats soulignent la nécessité de l'existence de concentrations de contraintes assez importantes, résultants de mécanismes collectifs des dislocations, tels que la formation d'empilements devant ou autour des précipités.

---

### V.3. Vers un modèle rendant compte de l'ancrage des systèmes de glissement par la déviation

Nous allons achever ce chapitre par une discussion visant à définir comment rendre compte de l'influence des débris et super-crans formés par déviation sur l'écoulement des systèmes de glissement. Comme cela a été discuté par Hoc et ses collaborateurs dans le cas des matériaux CFC [Hoc *et al.* 2004, Devincere *et al.* 2007], rendre compte de la présence de ces débris dans un modèle cristallin n'est pas aisé. Par exemple, dans le cadre du formalisme des lois constitutives proposées par Kocks et Mecking [Mecking et Kocks 1981,], toute augmentation de densité est associée à une déformation plastique. Or, comme nous l'avons montré plus haut, bon nombre des événements de déviation mécanique ne s'accompagnent pas d'une déformation plastique significative sur les systèmes déviés [Devincere *et al.* 2007], alors que leur densité est importante, et qui plus est, affectée par différents éléments.

Pour éviter de doubler la discussion, les situations avec et sans particules sont traitées de front. Nous verrons d'ailleurs que les résultats sont semblables sur le plan qualitatif. Pour les besoins de cette partie, les simulations de l'érouissage latent ont été utilisées une troisième

fois, en incorporant à la fois les interactions avec la forêt, la présence des carbures et le glissement dévié des vis. Le détail des simulations n'est pas présenté ici dans un souci de concision. Notons simplement que ces simulations ont été réalisées avec un chargement tel que  $m_d = 0,5 m_1$ .

### V.3.1. L'effet durcissant du glissement dévié

La nature même de la déviation, qui consiste au glissement d'une dislocation de même vecteur de Burgers sur un autre plan, et les microstructures avec GD semblables à celles obtenues dans le cas de l'interaction colinéaire, rappellent que le glissement dévié est équivalent à produire des segments de dislocations d'un système colinéaire. Ces observations suggèrent donc que l'interaction avec les sections déviées est équivalente à celle ayant lieu entre deux systèmes colinéaires. Une première idée simple pour rendre compte de la présence des supercrans déviés et des boucles débris, consiste donc à introduire un nouveau coefficient d'interaction  $\beta_{dév}$  égal au coefficient colinéaire, valant 0,527 (cf. chapitre III).

Pour tester cette hypothèse, la comparaison est faite entre la prédiction du modèle utilisé jusque là avec les résultats des simulations de DD. Pour rappel, nous avons vu que la contrainte d'écoulement sur le système primaire s'écrit :

$$\tau_c = \mu b \sqrt{\sum_j \chi \beta_j \rho_j + \beta_p \rho_p} + \tau_F \quad \text{Équation V.1}$$

Cette relation fait apparaître les densités totales  $\rho_j$  de tous les systèmes de glissement qui conduisent à la même interaction  $j$ , ainsi qu'un terme additionnel rendant compte du durcissement des précipités. Les densités  $\rho_j$  sont pondérées par des coefficients d'interactions  $\beta_j$  définis au chapitre III, concernant la forêt, et au chapitre IV pour les particules. Les facteurs  $\chi$  ont été introduits dans le chapitre III, pour tenir compte du terme logarithmique de l'énergie de ligne. Il s'écrit :

$$\chi = \left[ \frac{\ln(b\sqrt{\beta_j \rho_j})}{\ln(b\sqrt{\beta_j \rho_{ref}})} \right]^2 \quad \text{Équation V.2}$$

$\rho_{ref} = 2 \cdot 10^{13} \text{ m}^{-2}$  est la densité de référence à laquelle le coefficient d'interaction est déterminé. Cette correction est nécessaire pour les obstacles de la forêt, puisque leur densité évolue au cours de la déformation.  $\chi$  vaut 1 dans le cas des carbures. Les valeurs des coefficients sont données dans les chapitres III et IV. La prédiction réalisée à l'aide de l'équation V.1 est comparée à la contrainte d'écoulement obtenue par différentes simulations de l'interaction dipolaire et de l'écrouissage latent avec et sans carbures. Les densités nécessaires à la résolution de l'équation V.1 sont obtenues à partir des simulations.

La figure V.11 reporte la comparaison entre le modèle et les simulations, et donne des

résultats différents suivant la nature de l'interaction. L'accord est assez bon au sujet des interactions dipolaires et colinéaires. Concernant la première, la densité de débris reste faible et donc pratiquement négligeable, tandis que pour la seconde la densité de débris issus de la déviation est faible devant la densité des systèmes de la forêt colinéaire. En revanche, les contraintes obtenues pour toutes les jonctions sont nettement sous estimées par l'équation V.1, ce qui représente une différence de l'ordre de 15 MPa en fin de simulation, soit environ 20 %. Cet écart systématique suggère que le durcissement associé aux super-crans déviés est supérieur à celui associé aux interactions colinéaires. Par une approche inverse, il est possible de définir un coefficient  $\beta_{dév}$  qui permette de reproduire simultanément les différents durcissements observés. **Une valeur de  $0,85 \pm 0,05$  permet d'obtenir un bon compromis** pour l'ensemble des simulations testées.

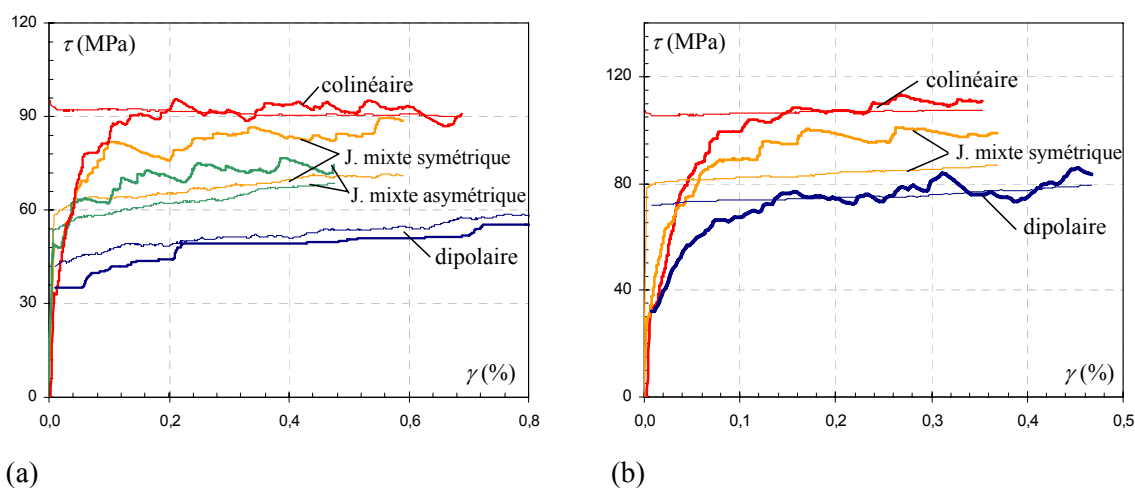


Figure V.11. Comparaison entre la prédiction du modèle (en traits fins) proposé dans ce travail avec les résultats des simulations (en traits épais) de l'interaction dipolaire et de l'écrouissage latent lorsque le GD est actif. Les simulations ont été réalisées (a) sans carbure et (b) avec carbures.

Le fait que  $\beta_{dév}$  soit supérieur au coefficient colinéaire, suggère que l'interaction avec les super-crans et débris formés par la déviation diffère de l'interaction colinéaire. Cette différence est confirmée lors de la comparaison plus approfondie des microstructures respectives formées durant les deux types de simulations. L'interaction entre deux systèmes colinéaires simulée au chapitre III, met en jeu de longues dislocations. Tandis que le glissement dévié induit la formation de super-crans déviés nombreux et relativement courts. En outre, ces courts segments colinéaires ont moins de chance d'être intersectés par des dislocations mobiles et induisent ainsi peu d'annihilation colinéaire.

Dans la mesure où ces super-crans et débris issus de la déviation ne participent pas à la déformation plastique et comme il ne s'agit pas à proprement parler d'obstacles de la forêt

colinéaires, il est raisonnable d'associer cette densité à la densité des systèmes primaires, à l'image de ce qui a été proposé par Hoc *et al.* [Hoc *et al.* 2004]. Ainsi, on introduit une interaction dipolaire effective qui tient en compte de l'existence de ces débris. Cette définition est celle qui a permis de reproduire le taux d'érouissage du stade I des matériaux CFC, jusqu'alors sous estimé par la DD [Hoc *et al.* 2004]. Ceci fait l'objet du paragraphe suivant.

### V.3.2. Evolution des densités de dislocations

Les parties précédentes ont montré que l'activité du glissement dévié est affectée par trois paramètres clefs : (i) le facteur de Schmid sur les systèmes déviés modifie la contribution du chargement à la déviation, (ii) la force des obstacles qui modifient le nombre d'évènements de déviation et la densité des super-crans et des boucles débris, (iii) la présence des carbures qui augmente le taux de stockage des dislocations primaires, et introduit des concentrations de contraintes favorisant la déviation. Nous avons également obtenu que la densité déviée  $\rho_d$  et primaire  $\rho_1$  évoluent toujours de manière linéaire avec la déformation. Le rapport entre ces deux densités est par conséquent constant. Il constitue en quelque sorte une mesure de l'activité du glissement dévié. La figure V.12.a montre l'influence significative du facteur de Schmid sur l'activité du GD. Le rapport  $\rho_d/\rho_1$  augmente d'une manière quasi quadratique avec le facteur de Schmid  $m_d$ . Une courbe de régression est recherchée dans le but de disposer d'une loi définissant la densité de dislocations déviée quel que soit le facteur de Schmid sur ces systèmes. De cette manière, les densités relatives de dislocations déviées peuvent être approchées par

$$\frac{\rho_d}{\rho_1} = 0,025 + 1,16 \left( \frac{m_d}{m_1} \right)^2 \text{ sans la contribution des carbures et par } \frac{\rho_d}{\rho_1} = 0,013 + 0,8 \left( \frac{m_d}{m_1} \right)^2 \text{ lorsque}$$

ces derniers sont introduits.

Parallèlement à cela, la figure V.12.b montre l'influence des interactions de la forêt sur le stockage des super-crans et débris issus de la déviation. Les valeurs reportées correspondent à la compilation des résultats (i) de la simulation de l'interaction dipolaire et (ii) des simulations de l'érouissage latent pour deux jonctions, une faible et une forte. Les facteurs de Schmid sur les deux systèmes déviés sont égaux et valent  $0,5 m_1$ . La figure V.12.b montre que **l'activité du glissement dévié augmente significativement avec le coefficient d'interaction mis en jeu**. Toujours dans l'idée de se rapprocher d'un modèle prédictif simple, nous recherchons à présent une régression linéaire qui reproduise bien les résultats de la simulation. Dans le cas où, il n'existe aucun obstacle au système primaire, correspondant à  $\beta_j = 0$ , qui est un cas imaginaire, il est évident que la densité déviée doit être nulle puisque rien ne s'oppose au glissement selon le plan initial ( $m_1 > m_d$ ). C'est pourquoi l'ordonnée à l'origine de la droite de régression doit être nulle. Ainsi on peut écrire la densité déviée comme  $\rho_d = (0,5\sqrt{\beta_j})\rho_1$  et  $\rho_d = (0,9\sqrt{\beta_j})\rho_1$

respectivement avec et sans carbure. Ces deux courbes sont reportées dans la figure V.12.b.

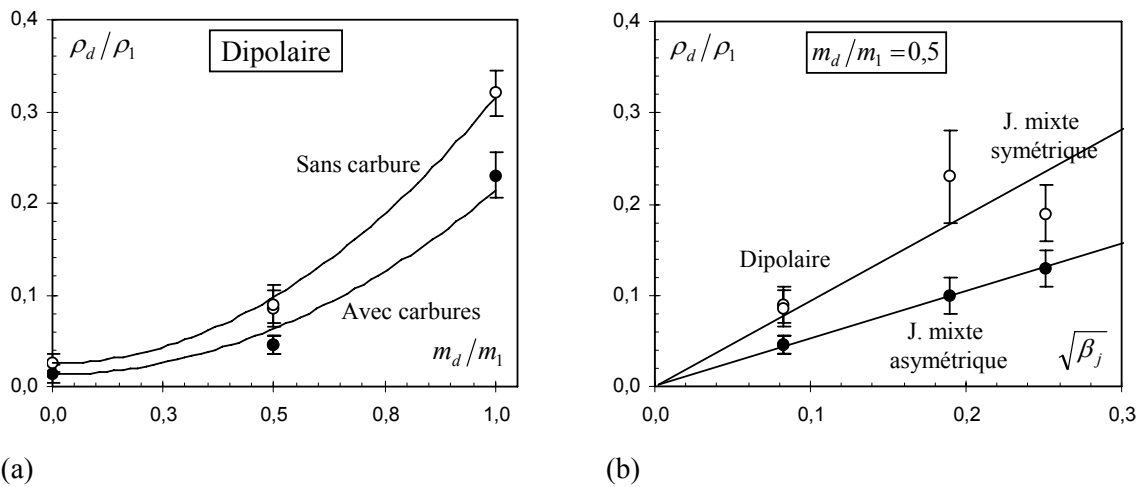


Figure V.12. (a) Influence du facteur de Schmid sur l'activité du GD, au cours des simulations de l'interaction dipolaire. Les valeurs à l'origine correspondent à la densité du système dévié qui présente un facteur  $m_d$  nul dans le cas d'un chargement GM. (b) Effet de la force de l'interaction sur l'activité du GD. Les cercles noirs correspondent aux simulations réalisées avec carbures.

Ces deux relations très simples permettent donc de définir la densité de super-crans formés par déviation en fonction des interactions individuelles de la forêt lors de simulations modèles de l'écroissage latent. En revanche, dans des conditions plus réalistes, le comportement plastique est le résultat de multiples interactions avec les différents systèmes mis en jeu. La seule solution simple pour faire le lien avec les résultats précédents, est de définir la densité de super-crans formés par la déviation à partir d'une interaction moyenne. Un coefficient moyen  $\alpha = 0,34$  a été déterminé au cours du chapitre III. On considère le cas où  $m_d = 0,5 m_l$ . En partant des deux régressions linéaires obtenues plus haut, la densité de crans déviés  $\rho_d$  est estimée à  $(0,9 \alpha) \rho_1 = 0,3 \rho_1$  avec la forêt seule, et respectivement à  $0,17 \rho_1$  en présence des carbures. En suivant le formalisme proposé par Hoc *et al.* [Hoc *et al.* 2004], on introduit le coefficient dipolaire effectif  $\beta_{dip}^* = \beta_{dip} + \beta_{dév}(\rho_d / \rho_1)$ . Avec  $\beta_{dip} = 0,0068$  et  $\beta_{dév} = 0,85$ , il suit **un coefficient dipolaire effectif égal à 0,25 sans carbures.**

Cette dernière valeur est un peu plus élevée que celle mesurée dans le cas des matériaux CFC [Devincre *et al.* 2007], supérieure à 0,1. Néanmoins, ce résultat est consistant avec notre hypothèse d'un GD purement mécanique et donc très facile. Du reste, ceci est également en accord avec l'écart existant entre les taux d'écroissage du premier stade, qui dans le cas des CFC est proche de  $\mu/3000$  [Mitchell 1964, Takeuchi 1975], alors qu'il est compris entre  $\mu/1000$  et  $\mu/2000$  concernant le fer (*cf.* chapitre I). Ainsi, le GD qui est plus facile dans les matériaux CC, constitue une des explications à l'écroissage plus fort constaté au premier stade dans les

matériaux CC.

En suivant la même démarche, on trouve un coefficient dipolaire effectif  $\beta_{dip}^*$  de 0,15 lorsque les carbures sont présents.

### V.3.3. Validation : simulation du glissement simple avec glissement dévié

Afin de valider la démarche proposée pour tenir compte du durcissement associé aux super-crans et débris déviés, nous reprenons la simulation présentée dans le chapitre IV. Il s'agit d'une traction suivant un axe [1 5 11] qui est au centre du triangle standard. Un seul système est actif, il s'agit ici du système n°1 du tableau III.1. Il interagit avec une forêt d'une densité de  $10^{14} \text{ m}^{-2}$ , et répartie uniformément sur tous les systèmes. Une distribution de carbures est également introduite, avec les densités et diamètres caractéristiques des aciers de cuve. Les conditions et configurations initiales sont détaillées dans le chapitre précédent. La différence majeure vient ici de l'activation du glissement dévié. Selon cet axe de sollicitation, le facteur de Schmid  $m_d$  sur les systèmes déviés est égal à  $0,5 m_l$ .

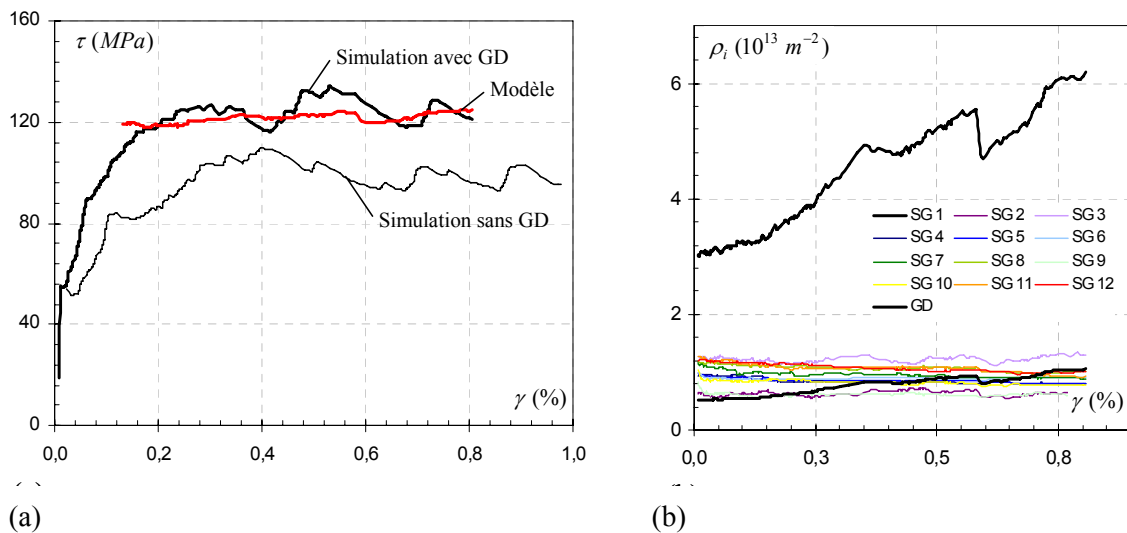


Figure V.13. (a) Courbe de déformation correspondant au glissement simple du système n°1, avec la présence de carbures, et le glissement dévié est activé. La comparaison est faite avec la prédiction du modèle proposé dans le texte incluant l'existence d'une densité et d'une interaction dipolaires effectives. (b) Evolution des densités des différents systèmes au cours du cisaillement.

La courbe de déformation de cette simulation est reportée dans la figure V.13, elle est comparée à celle obtenue au chapitre IV sans GD. Son allure s'apparente à un plateau à hauteur de 120 MPa. De fortes fluctuations de l'ordre de 10 % sont présentes, et avaient déjà été observées sur la courbe sans GD. La comparaison avec la courbe sans GD, met en évidence l'influence significative de la formation des super-crans déviés sur la contrainte d'écoulement qui est

accrue de 20 MPa. Nous allons à présent chercher à retrouver ces résultats à l'aide de notre modèle donné en équation V.1. Nous avons vu dans la partie précédente que la densité de super-crans formés par la déviation est égale ici  $\rho_d = 0,17 \rho_1$ , et le coefficient d'interaction dipolaire  $\beta_{dip}^*$  vaut 0,15 (cf. V.3.2).

La prédiction du modèle est comparée à la contrainte d'écoulement simulée dans la figure V.13. En faisant abstraction des fluctuations de la courbe simulée, le modèle reproduit correctement le niveau de contrainte atteint. La figure V.13.b montre que la densité du système primaire (n°1) a atteint  $6,2 \cdot 10^{13} \text{m}^{-2}$  en fin de simulation, tandis que la densité de débris et de super-crans déviés  $\rho_d$ , calculée à partir de  $\rho_d = 0,17 \rho_1$ , vaut  $10^{13} \text{m}^{-2}$ . Cette densité représente la moitié de la densité totale sur les deux systèmes colinéaire (n°2 et 3), obtenue au cours de la simulation.

Ce test démontre donc qu'il est possible de (i) correctement prédire la densité de débris et super-crans issus de la déviation, à partir de la force moyenne des interactions en présence ; (ii) et de bien reproduire la réduction de la mobilité du système actif par les super-crans formés par la déviation.

Pour finir, il est nécessaire de rappeler que ce modèle requière l'évaluation de la densité de super-crans formés par la déviation, qui intervient dans le coefficient  $\beta_{dip}^*$ . Or, nos simulations ont montré, que l'activité de la déviation peut être modifiée notamment par le chargement via le facteur de Schmid sur les différents systèmes de glissement (voir aussi [Kubin *et al.* 2006]). A l'échelle macroscopique, les paramètres du modèle risquent donc d'évoluer, en particulier à grande déformation, pour tenir compte par exemple des rotations cristallines.



## Résumé

---

Dans cette dernière partie, nous avons cherché à reproduire le durcissement associé à la formation de super-crans et débris formé par la déviation. Pour cela, les résultats obtenus au cours des simulations de l'interaction dipolaire et de l'écrouissage latent sont repris. L'hypothèse la plus simple qui consiste à assimiler les petits segments formés par déviation, comme des obstacles colinéaires sous estime le durcissement observé au cours des simulations. Par démarche inverse, un coefficient plus fort est proposé, permettant de bien reproduire les différents résultats obtenus.

La compilation des résultats avec et sans précipité, montre que la densité de super-crans colinéaires, et donc le durcissement associé, est affectée par deux paramètres clefs :

d'une part le rapport entre les facteurs de Schmid des systèmes primaires et déviés qui augmente de manière quadratique la densité de crans et débris formé par la déviation,

d'autre part la déviation augmente de manière proportionnelle à la force des interactions mises en jeu lors de la déformation.

Le durcissement lié à la présence des super-crans déviés sur les dislocations primaires est pris en compte par le biais d'un coefficient dipolaire effectif.

---

**Bibliographie**

- [Bacon *et al.* 1973] D. J. Bacon, U. F. Kocks, R. O. Scattergood, *Phil. Mag.* **28**,1241 (1973).
- [Brown et Ham 1971] dans A. Kelly and R.B. Nicholson, éditeurs, *Strengthening Methods in Solids*, chapter 2, pages 9–135. Applied Science Publishers, Barking, Essex (UK), 1971.
- [de Sansal 2007] C. de Sansal, thèse de l’Ecole Centrale Paris (2007).
- [Déprés *et al.* 2004] C. Déprés, C. F. Robertson, M. C. Fivel, *Phil. Mag.* **84**, 2257 (2004).
- [Devincre *et al.* 2006] B. Devincré, T. Hoc, L. Kubin, *Scripta Mater* **54**, 741 (2006).
- [Devincre *et al.* 2007] B. Devincré, L. Kubin, T. Hoc, *Scripta Mat.* **57**, 905 (2007).
- [Domain et Monnet 2005] C. Domain, G. Monnet, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 215506 (2005).
- [Escaig 1967] B. Escaig, *J. Physique* **29**, 225 (1967).
- [Franciosi 1983] P. Franciosi, *Acta Metall.* **31**, 1331 (1983).
- [Franciosi, 1984] P. Franciosi, Thèse de doctorat de l’Université Paris-Nord (1984)
- [Frederiksen et Jacobsen 2003] S. L. Frederiksen, K. W. Jacobsen, *Phil. Mag.* **83**, 365 (2003).
- [Hirth et Lothe 1982] J. P. Hirth, J. Lothe, dans *Theory of dislocations*, Malabar Florida Krieger Publishing Company (1982).
- [Hoc *et al.* 2004] T. Hoc, B. Devincré, L.P. Kubin 25th Riso International Symposium on Materials Science **43**, (2004).
- [Keh 1964] A. S. Keh, *Phil. Mag. Ser.* **8**, **12**, 9 (1964).
- [Kocks et Mecking 2003] U.F. Kocks, H. Mecking, *Prog. Mat. Sci.* **48**, 171 (2003).
- [Kubin *et al.* 2006] L. P. Kubin, B. Devincré, T. Hoc, *Phil. Mag.* **86**, 4023 (2006).
- [Kubin et Devincré 1999] L.P. Kubin, B. Devincré, From dislocation mechanisms to dislocation microstructures and strain hardening, in: J.B. Bilde-Sorensen, *et al.* (Eds.), *Deformation-Induced Microstructures: Analysis and Relation to Properties*, Risoe National Laboratory, Roskilde, Denmark, 61 (1999).
- [Madec 2001] R. Madec, Thèse de doctorat de l’Université de Paris XI (2001).
- [Madec *et al.* 2002] R. Madec, B. Devincré, L. P. Kubin, *Scripta Mater.* **47**, 689 (2002).
- [Madec et Kubin 2004] R. Madec and L. P. Kubin CIMTEC proceedings, 671 (2004).
- [Mecking et Kocks 1981] H. Mecking, U. F. Kocks, *Acta Metall.* **29**, 1875 (1981).
- [Mecking et Kocks 1981] H. Mecking, U. F. Kocks, *Acta Metall.* **29**, 1875 (1981).
- [Mitchell 1964] T. E. Mitchell, *P. Appl. Mater. Res.* **6**, 77 (1964).
- [Püschl 2002] W. Püschl, *Prog. Mater. Science* **47**, 415 (2002).
- [Rasmussen *et al.* 1997] T. Rasmussen, K. W. Jacobsen, T. Leffers, O. B. Pedersen, S. G. Srinivasan, H. Jónsson, *Phys. Rev. Letter* **79**, 3676 (1997).

- [Rhee *et al.* 1998] M Rhee, H M Zbib, J P Hirth, H Huang, T de la Rubia, Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. **6**, 467 (1998).
- [Shin *et al.* 2003] C. S. Shin, M. C. Fivel, M. Verdier, K. H. Oh, Phil. Mag. **83**, 3691 (2003).
- [Takeuchi *et al.* 1967] S. Takeuchi, E. Furubayashi, T. Taoka, Acta Metallall. **15**, 1179 (1967).
- [Taoka *et al.* 1964] T. Taoka, S. Takeuchi, E. Furubayashi, J. Phys. Soc Japan **19**, (1964).
- [Weygand et Gumbsch 2005] D. Weygand, P. Gumbsch, Mater. Science Eng. **A400-401**, 158 (2002).
- [Xiang *et al.* 2003] Y. Xiang, D. J. Srolovitz, L. T. Cheng, E. Weinan, Acta Mat. **52**, 1745 (2003).
- [Zbib 2000] H. M. Zbib, T. Diaz de la Rubia, M. Rhee, J. P. Hirth, J. Nucl. Mater. **276**, 154 (2000).



---

## CHAPITRE VI. DURCISSEMENT INDUIT PAR LES DEFAUTS D'IRRADIATION

---

<b>Introduction</b>	<b>167</b>
<b>VI.1. Les défauts d'irradiation dans les aciers de cuve</b>	<b>168</b>
VI.1.1. Conditions d'irradiation et les différents défauts formés	168
VI.1.2. Microstructure d'irradiation	170
VI.1.3. La force des défauts individuels	174
<b>VI.2. Etude du durcissement des cavités par dynamique de dislocations</b>	<b>178</b>
VI.2.1. Loi de transition d'échelle	178
VI.2.2. Durcissement induit par la microstructure des cavités	182
VI.2.3. Vers une description complète de l'état irradié	189
<b>Résumé</b>	<b>192</b>
<b>Bibliographie</b>	<b>193</b>

---

### Introduction

Ce dernier chapitre est consacré à la compréhension des mécanismes de durcissement dans les aciers de cuve à l'état irradié. Le rayonnement neutronique, qui a lieu au cœur du réacteur, induit un certain nombre de défauts qui évoluent et interagissent. Ceci donne lieu à la formation d'une microstructure d'irradiation. L'interaction des dislocations avec cette dernière est la source d'un durcissement supplémentaire qui peut être important, étant donnée la densité et la force de ces défauts. Avant toute chose, une revue bibliographique sera proposée pour définir la nature de la microstructure d'irradiation. Ensuite, comme il s'agit de défauts nanométriques qui interagissent d'une manière complexe avec les dislocations, nous verrons comment passer des études de DM, qui ont défini la force de ces obstacles, à leur traitement dans les simulations de

DD. Pour cela, une loi de transition d'échelle simple est proposée, afin d'assurer le passage de l'échelle microscopique à celle mésoscopique.

La contrainte d'écoulement associée à une microstructure simplifiée d'irradiation sera ensuite déterminée à l'aide de la DD. La microstructure et la force des défauts sont définies à partir des résultats de la littérature. Nous verrons le rôle primordial de la température sur ce mécanisme de durcissement. Et enfin, ce chapitre s'achèvera logiquement sur une discussion concernant le durcissement total sous irradiation.

## **VI.1. Les défauts d'irradiation dans les aciers de cuve**

L'étude du dommage d'irradiation des matériaux est une problématique abordée depuis une trentaine d'années. Les travaux sont désormais assez nombreux, que ce soit sur le plan des caractérisations expérimentales, mettant en jeu un large éventail de techniques (*i.e.* [Auger *et al.* 1994, Eldrup *et al.* 2002, Fujii et Fukuya 2004]), ou sur le plan de simulations numériques aux différentes échelles concernées par le dommage sous irradiation [Stoller *et al.* 1997, Vincent *et al.* 2006, Vincent *et al.* 2006, Christien et Barbu 2004, Zbib *et al.* 2000, Ghoniem *et al.* 2002]. Des revues sont disponibles à ce sujet dans [Jumel *et al.* 2000, Odette *et al.* 2001]. Nous verrons que de multiples paramètres influencent les résultats, les plus importants sont liés aux conditions d'irradiation et à la composition des matériaux. C'est pourquoi, l'objectif de cette revue bibliographique n'est pas de rassembler la totalité des travaux sur le sujet, mais plutôt d'en présenter une vision synthétique, qui sera le point de départ des simulations de DD. Ainsi, cette revue se scinde en deux parties : (i) tout d'abord, définir la microstructure d'irradiation en terme de défauts, densités, tailles et leurs propriétés. (ii) Puis, montrer la nature et la force d'interaction entre défauts d'irradiation et dislocations.

### **VI.1.1. Conditions d'irradiation et défauts formés**

Le rayonnement neutronique, et en particulier les neutrons de haute énergie  $E > 1$  MeV issu du cœur du réacteur, interagit avec la matière et provoque de multiples cascades de déplacements atomiques qui aboutissent à la formation de défauts ponctuels : lacunes et atomes interstitiels. Leur évolution au cours du temps et leurs interactions avec les cascades suivantes ou les défauts déjà présents conduisent à la formation de défauts d'irradiation de différentes natures. Dans le cas des aciers de cuve, ils sont au nombre de quatre [Auger *et al.* 1994, Fujii et Fukuya 2004] :

- Tout d'abord, les observations réalisées par Sonde Atomique (SA) révèlent l'existence d'amas d'éléments d'alliage. Ils sont constitués de Ni, Cu, Mn, ou Si [Miller et Burke 1992, Auger *et al.* 1994]. Néanmoins, exception faite du cuivre sur lequel nous

reviendrons, ces amas restent assez dilués. La concentration en fer est en effet de plus de 70 % [Auger *et al.* 1994] (Auger *et al.* [Auger *et al.* 1994] évaluent à partir de leurs mesures faites à la SA une composition moyenne de ces amas). Toujours par SA, certaines études rapportent l'observation de dislocations décorées par de tels amas [Meslin-Chiffon 2007].

- Le regroupement des atomes de cuivre conduit à la formation de précipités sphériques [Buswell *et al.* 1995, Miller *et al.* 2007] qui peuvent être cohérents suivant leur taille, la température et la teneur en cuivre (*cf.* [Vincent 2006]). L'existence de ces précipités est parfois remise en question, notamment par les observations à la SA mettent plutôt en évidence des amas assez concentrés en Cu [Pareige 94, Auger *et al.* 2000], alors que le travail de Buswell *et al.* [Buswell *et al.* 1995] par Diffusion de Neutrons aux Petits Angles (DNPA) montre des précipités pratiquement purs. Miller *et al.* [Miller *et al.* 2007] ont récemment suggéré que les observations de SA ne permettent pas de distinguer des précipités de Cu d'amas plus dilués, à cause du rendement de détection lié à cette technique. Le cuivre se démarque aussi des autres éléments d'alliage parce qu'il est pratiquement inexistant de la matrice après irradiation, comme le montre les mesures de SA réalisées par Auger *et al.* [Auger *et al.* 1994].
- Des boucles de dislocations sont également observées [Kuleshova *et al.* 2005, Fujii et Fukuya 2004, Almazouzi 2006, Kočík *et al.* 2002, Zinkle et Singh 2006]. Elles présentent généralement un vecteur de Burgers du type  $\langle 100 \rangle$  et un plan d'habitat suivant les  $\{100\}$  [Fujii et Fukuya 2004, Almazouzi 2006]. Certaines études rapportent l'existence de boucles  $\frac{1}{2}\langle 111 \rangle\{110\}$ , qui restent moins nombreuses que les premières [Almazouzi 2006, Zinkle et Singh 2006, Fujii et Fukuya 2004]. Les approches numériques [Stoller *et al.* 1997, Osetsky *et al.* 1997, Wirth *et al.* 2000] montrent que la formation de boucles  $\frac{1}{2}\langle 111 \rangle\{110\}$  est plus favorable que celle des  $\langle 100 \rangle\{100\}$ . Leur nature est généralement admise comme étant interstitielle, c'est-à-dire résultant du regroupement des atomes de fer interstitiels [Stoller *et al.* 1997, Osetsky *et al.* 1997, Wirth *et al.* 2000]. Ces mêmes travaux montrent également que les boucles  $\frac{1}{2}\langle 111 \rangle\{110\}$  sont très mobiles suivant les plans denses  $\{110\}$  [English *et al.* 1990, Phythian *et al.* 1995, Arakawa *et al.* 2004]. Certains auteurs [Osetsky *et al.* 1997] indiquent que les boucles ont la possibilité de changer de plan d'habitat par rotation autour du vecteur de Burgers. Le mécanisme aboutissant à formation des boucles  $\langle 100 \rangle\{100\}$  est encore incertain. Deux points de vue ont été proposés : soit la formation a lieu à partir de dislocations existantes dans un plan  $\{110\}$  [English *et al.* 1980], soit ces

boucles  $\langle 100 \rangle \{100\}$  sont issues de l'intersection entre des boucles  $\frac{1}{2}\langle 111 \rangle \{110\}$  [Marian et Wirth 2002].

- Enfin, les lacunes se regroupent pour former des cavités nanométriques [Eldrup 2006, Zinkle 2006, Stoller *et al.* 1997]. La densité de ces défauts est généralement mesurée par spectroscopie d'Annihilation de Positons (AP). Ces cavités présentent une morphologie plutôt sphérique. Certains auteurs suggèrent qu'elles sont parfois décorées par des éléments d'alliage, en particulier par du cuivre [Meslin-Chiffon 2007, Miller *et al.* 2007].

Il est à noter que Faulkner *et al.* [Faulkner *et al.* 2005] ont observé au MET un grossissement de carbures existants et la création de nouveaux carbures lors de l'irradiation aux neutrons de différents aciers de cuve. Mais les nuances de cette étude présentent une teneur en carbone bien supérieure à celle de l'acier 16MND5. Il n'est donc pas certain que cette précipitation de carbures provoquée par l'irradiation ait lieu dans les aciers de cuve français, d'autant plus que ce phénomène n'a pas été rapporté par ailleurs.

Comme nous le verrons un peu plus loin, les conditions d'irradiation influencent fortement la nature des défauts ainsi que la microstructure d'irradiation. Le flux typique reçu par les cuves françaises est de l'ordre de  $7,2 \cdot 10^{10} \text{ n cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$  (selon un rapport interne à EDF), pour les neutrons rapides ( $E > 1 \text{ MeV}$ ). Par intégration de ce flux sur la durée initiale de vie de 40 ans des centrales, nous obtenons une fluence totale de l'ordre de  $6,5 \cdot 10^{19} \text{ n cm}^{-2}$  (selon le même rapport interne à EDF), équivalent à un peu moins de 0,1 dpaNRT (déplacement par atome) qui est la valeur généralement étudiée [Christien et Barbu 2004, Meslin-Chiffon 2007]. Il faudra ajouter à cette valeur 50 % de fluence supplémentaire dans l'hypothèse de l'allongement de la durée d'exploitation des centrales à 60 ans. Enfin, la température des cuves au cours du fonctionnement est en moyenne de 290 °C.

## VI.1.2. Microstructure d'irradiation

### Observations expérimentales

Les différents défauts induits par irradiation étant introduits, nous allons chercher à quantifier la microstructure d'irradiation en terme de densités et tailles. Or, cette identification est difficile dans la mesure où ces objets sont de tailles nanométriques dans le fer (*i.e.* [Auger *et al.* 1994, Fujii et Fukuya 2004]), ce qui les rend difficiles à observer par des techniques expérimentales usuelles. Il se pose ensuite des problèmes liés au magnétisme du fer. Comme souvent, le choix de la technique expérimentale impose de faire un choix entre le volume



analysé et la résolution spatiale. De plus, les conditions d'irradiation en réacteurs expérimentaux sont parfois assez différentes de celles subies au sein des centrales nucléaires. Par exemple, l'augmentation de la température d'irradiation favorise la mobilité des défauts ponctuels (interstitiels ou lacunes), ce qui induit un grossissement des défauts existants ainsi qu'une réduction de leur nombre. Cet effet a été montré dans le cas du fer irradié aux neutrons par Horiki *et al.* [Horiki *et al.* 1999, Horiki *et al.* 2000], à l'aide de mesures par AP. A l'inverse, l'augmentation du flux accroît la production de défauts ponctuels et par conséquent augmente la densité de défauts d'irradiation alors que leur taille diminue [Meslin-Chiffon 2007]. L'effet de la fluence est relativement prévisible dans la mesure où la quantité de défauts ponctuels produits est accrue. Ceci a été montré à l'aide de mesures par AP pour des cavités dans le fer pur [Eldrup 2002, Horiki *et al.* 2000]. Les observations réalisées à la SA par Auger *et al.* [Auger *et al.* 1994] conduisent à la même conclusion concernant les amas de solutés, y compris le cuivre, dans l'acier 16MND5. Horiki *et al.* [Horiki *et al.* 2000] ont, quant à eux, observé le grossissement de boucles de dislocations au cours de l'irradiation du fer. En revanche, toutes les études semblent montrer une saturation de la densité de défauts avec l'augmentation de la dose, comme en témoigne la figure VI.1 [Eldrup *et al.* 2002].

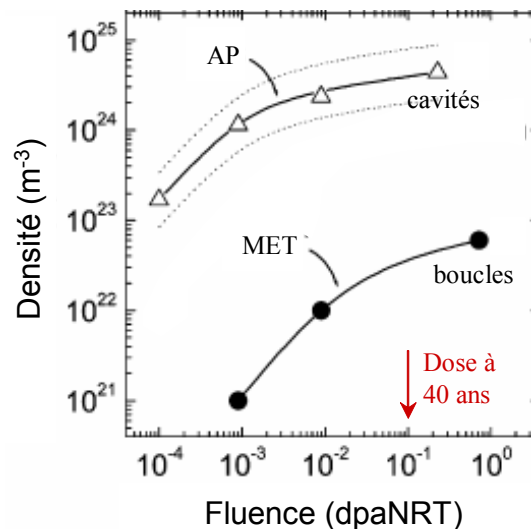


Figure VI.1. Evolution de la densité des cavités (triangles) et des boucles (cercles) en fonction de la dose d'irradiation neutronique dans le fer pur. D'après Eldrup *et al.* [Eldrup *et al.* 2002].

Enfin le dernier point important concerne la composition des matériaux irradiés. En effet, les travaux sur des matériaux modèles ont mis en évidence l'importance des interactions entre les défauts ponctuels sur la microstructure. Le meilleur exemple est l'effet de certains éléments d'alliage, tel que le Mn, qui retarde la précipitation du cuivre [Meslin-Chiffon 2007]. Une revue à ce sujet est proposée dans [Vincent 2006].

Une compilation des données existantes est donnée dans le tableau VI.1. Elle résume les résultats obtenus en réacteurs expérimentaux dans différentes conditions d'irradiation aux neutrons et avec des matériaux proches de la nuance française d'aciers de cuve [Pareige 1994, Auger *et al.* 1994, Eldrup *et al.* 2002, Fujii et Kukuya 2004, Kuleshova *et al.* 2005, Miller *et al.* 2006, Zinkle et Singh 2006]. Puisqu'il n'existe pas de mesure par AP des cavités dans les aciers qui nous intéresse, certains résultats reportés concernent le fer. Nous verrons que la taille et la densité des cavités sont, de toute façon, moins affectées par les éléments d'alliage.

Tout d'abord, il est intéressant de noter le relativement bon accord entre ces études. Les densités et tailles des différents défauts observés sont, en effet, assez similaires à un ordre de grandeur près. Les analyses réalisées par sonde atomique ont mis en évidence que les amas de solutés, comprenant le cuivre, sont parmi les défauts les plus nombreux, avec une densité supérieure à  $10^{23} \text{ m}^{-3}$ . Ensuite, les études réalisées par AP permettent une meilleure caractérisation des cavités de petite taille que le MET, qui est limité en résolution spatiale. En revanche, cette technique est plus difficile à mettre en œuvre et à calibrer [Eldrup *et al.* 2002, Zinkle et Singh 2006]. Néanmoins, l'AP fait apparaître dans le fer une très grande densité de cavités, de l'ordre de  $10^{24} \text{ m}^{-3}$ . Enfin, les boucles de dislocations, qui sont généralement observées au MET, semblent présenter une plus faible densité que les autres défauts de l'ordre de  $10^{22} \text{ m}^{-3}$ . Il est toutefois possible qu'une partie des boucles soient de tailles inférieures au seuil de détection autorisé par cette technique.

Tableau VI.1. Compilation des caractérisations expérimentales des défauts d'irradiation sur des matériaux de cuve ou du fer, pour différentes irradiations. Les doses sont données pour les neutrons de haute énergie  $E > 1\text{MeV}$ .

Auteurs	Matériau	Flux	Fluence	Défauts	Densité	Taille
Pareige	16MND5	$1 \cdot 10^{11} \text{ n/cm}^2\text{s}$	$7 \cdot 10^{19} \text{ n/cm}^2$	Amas (SA)	$6 \cdot 10^{23} \text{ m}^{-3}$	3 nm
Auger <i>et al.</i>	16 MND5	$3 \cdot 10^{11} \text{ n/cm}^2\text{s}$	$1,4 \cdot 10^{20} \text{ n/cm}^2$	Amas (SA)	$1 \cdot 10^{24} \text{ m}^{-3}$	3-8 nm
Eldrup <i>et al.</i>	Fer	$4 \cdot 10^{14} \text{ n/cm}^2\text{s}$	0,72 dpaNRT	Boucles (MET)	$6 \cdot 10^{22} \text{ m}^{-3}$	> 5 nm
				Cavité (AP)	$4 \cdot 10^{24} \text{ m}^{-3}$	< 1,5 nm
Miller <i>et al.</i>	A533B	-	$5 \cdot 10^{19} \text{ n/cm}^2$	Amas (SA)	$3 \cdot 10^{23} \text{ m}^{-3}$	1nm
Fujii et Kukuya	A533B	$1 \cdot 10^{-4} \text{ dpa/s}$	1 dpaNRT	Boucles (MET)	$7 \cdot 10^{21} \text{ m}^{-3}$	2,5 nm
Zinkle et Singh	Fe	$7 \cdot 10^{-7} \text{ dpa/s}$	0,8 dpaNRT	Boucles (MET)	$6 \cdot 10^{22} \text{ m}^{-3}$	4 nm
				Cavité (AP)	$> 10^{24} \text{ m}^{-3}$	1 nm
Kuleshova <i>et al.</i>	VVER440	-	$\approx 0,1 \text{ dpaNRT}$	Boucles (MET)	$1-2 \cdot 10^{21} \text{ m}^{-3}$	9-10 nm
				Précipités Cu (MET)	$5-6 \cdot 10^{21} \text{ m}^{-3}$	5 nm

Nous verrons un peu plus loin que la force des cavités et des précipités dépend notamment de leur taille. Il est donc crucial de connaître leur distribution de manière précise. Or, vu la taille

nanométrique des défauts, les techniques expérimentales usuelles permettent seulement d'établir un diamètre moyen. Les simulations de cinétique chimique, qui sont relativement récentes, permettent répondre mieux à cette question. Elles sont l'objet de la partie suivante.

### Les résultats de la dynamique d'amas

Les calculs de Dynamique d'Amas (DA) réalisées par Barbu *et al.* [Christien et Barbu 2004, Meslin-Chiffon 2007] ont permis, à la fois, de confirmer les observations expérimentales présentées précédemment et de déterminer une distribution de taille de défauts. On trouvera une description plus détaillée de cette technique et de sa mise en oeuvre dans [Meslin-Chiffon 2007]. Le paramétrage des simulations correspond à du fer irradié à 300 °C, avec un taux de création de défauts de  $1,4 \cdot 10^{-7}$  dpaNRT/s et la dose atteinte est de 0,19 dpaNRT. Ces auteurs confirment ainsi les différences de densités constatées suivant la nature des défauts. Les cavités présentent une densité de  $2 \cdot 10^{23} \text{ m}^{-3}$ , supérieure de pratiquement un ordre de grandeur à celle des boucles qui est de  $4,7 \cdot 10^{22} \text{ m}^{-3}$ . Leurs résultats sont d'ailleurs en bon accord avec les observations expérimentales réalisées par Eldrup, dans des conditions d'irradiation semblables [Eldrup *et al.* 2002]. Les distributions de tailles de cavités et de boucles obtenues par Meslin-Chiffon [Meslin-Chiffon 2007] dans le fer pur sont données en figure VI.2. Les cavités présentent un rayon moyen de 1 nm, ce qui explique pourquoi elles ne sont pas observables au MET [Kuleshova *et al.* 2005, Eldrup *et al.* 2002]. Dans le cas des boucles, le maximum en terme de densité se situe aux alentours d'une taille de 2 nm et la distribution s'étend jusqu'à une dizaine de nanomètres. Dans le cadre de l'interaction avec les dislocations, le paramètre clef est la distance moyenne entre deux obstacles qui est liée à la densité surfacique  $N_s$  de chaque type de défauts d'irradiation. Il est possible de l'estimer à partir des tailles moyennes des défauts  $D$  et de la densité volumique  $N_v$  par la relation  $N_s = N_v D$ . Finalement, la densité surfacique de cavités est de  $4 \cdot 10^{14} \text{ m}^{-2}$ , soit seulement le double de celle des boucles.

Le travail réalisé par Pareige *et al.* [Pareige *et al.* 2006] sur l'irradiation d'un alliage Fe-Cu soulève un point nouveau concernant la précipitation du cuivre. Ces auteurs comparent des irradiations expérimentales à des simulations de cinétique chimique. La DA sous-estime considérablement les densités et tailles de précipités de cuivre en comparaison avec ce qui est observé expérimentalement. Ce résultat remet en cause l'hypothèse de précipitation homogène du cuivre qui est introduite dans les calculs de DA. La précipitation du cuivre est donc par opposition hétérogène, c'est-à-dire qu'elle se produit sur des défauts déjà présents comme des cavités, d'autres solutés ou des dislocations. Ceci a été confirmé par d'autres auteurs [Meslin-Chiffon 2007, Miller *et al.* 2007]. Néanmoins, à l'heure actuelle, le traitement de la précipitation hétérogène n'est pas possible dans les codes de DA. Il n'existe donc pas, concernant le cuivre, d'information plus précise sur les tailles que les valeurs moyennes déterminées

expérimentalement. Des travaux sont actuellement en cours pour améliorer les résultats de DA [Barbu 2007]. Les calculs à venir permettront, en particulier, de traiter la précipitation hétérogène du Cu et de tenir compte de la présence des autres éléments d'alliage qui, même si leur présence n'affecte pas significativement la formation des cavités et des boucles [Barbu 2007], influe sur la précipitation du Cu.

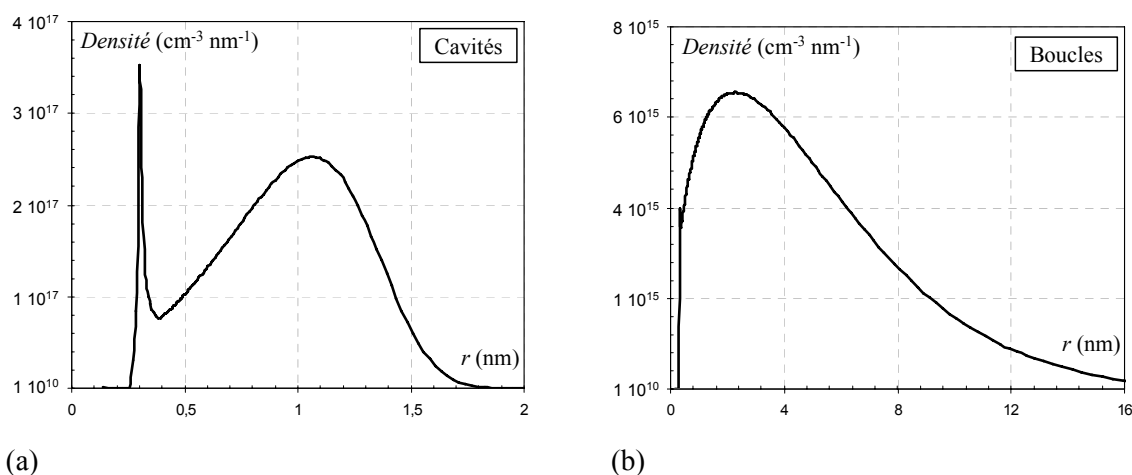


Figure VI.2. Distributions de taille des cavités (a) et des boucles interstitielles (b) obtenues par Meslin-Chiffon [Meslin-Chiffon 2007] par DA, dans le fer pur irradié aux neutrons à 300°C, après une dose de 0,19 dpaNRT. Le taux de création de défauts de  $1,4 \cdot 10^{-7}$  dpaNRT/s.

### VI.1.3. La force des défauts individuels

Cette partie va s'attacher à définir la nature et l'intensité de l'interaction entre dislocations et défauts d'irradiation. Ces travaux de DM portent essentiellement sur une dislocation coin d'un système  $\frac{1}{2} \langle 111 \rangle \{110\}$ , afin de s'affranchir de la question de la structure des vis qui n'a été résolue que récemment [Domain et Monnet 2005, Terentyev *et al.* 2007]. Les précipités de Cu et les cavités sont généralement traités simultanément de part la similitude de leurs résultats. En revanche, il n'existe pas d'information sur l'interaction dislocations - amas de solutés.

#### Les précipités de Cu et les cavités

Osetsky et collaborateurs [Osetsky *et al.* 2003] ont étudié en détail l'interaction entre une dislocation coin infinie et une rangée périodique d'obstacles : (i) de précipités de cuivre cohérents et (ii) de cavités. Ces différents obstacles, de forme sphérique, sont coupés en leur centre par le plan de glissement. Dans un premier temps, ces auteurs ont réalisé des simulations quasi-statiques (à 0 K). Ils montrent ainsi l'influence du diamètre  $D$  des obstacles et de la distance  $L$  les séparant sur la contrainte nécessaire au passage de la dislocation. Leurs

simulations montrent également que, à taille égale, les cavités constituent des obstacles bien plus forts que les précipités de cuivre.

La figure VI.3 présente la comparaison des contraintes pour les deux types d'obstacles obtenus par Osetsky *et al.* en fonction du diamètre harmonique  $\bar{D} = (D^{-1} + L^{-1})^{-1}$ . Ces résultats font apparaître, d'une part, la dépendance d'un terme logarithmique en fonction de  $\bar{D}$  dans la contrainte critique et, d'autre part, que l'écart entre les deux types de défauts se réduit pour les plus grandes tailles.

Cette figure donne également la comparaison avec le modèle proposé par Bacon *et al.* concernant le passage d'une rangée d'obstacles selon le mécanisme d'Orowan [Bacon *et al.* 1973]. Quel que soit leur diamètre, la contrainte pour passer les cavités est systématiquement supérieure au modèle de Bacon, tandis que les simulations concernant les précipités de cuivre sont en dessous du modèle de Bacon pour des diamètres inférieurs à 2 nm. La forme critique adoptée par les dislocations est en fait très proche de celle adoptée dans le cas d'obstacles impénétrables. Néanmoins aucune boucle d'Orowan n'est laissée après le passage de la dislocation.

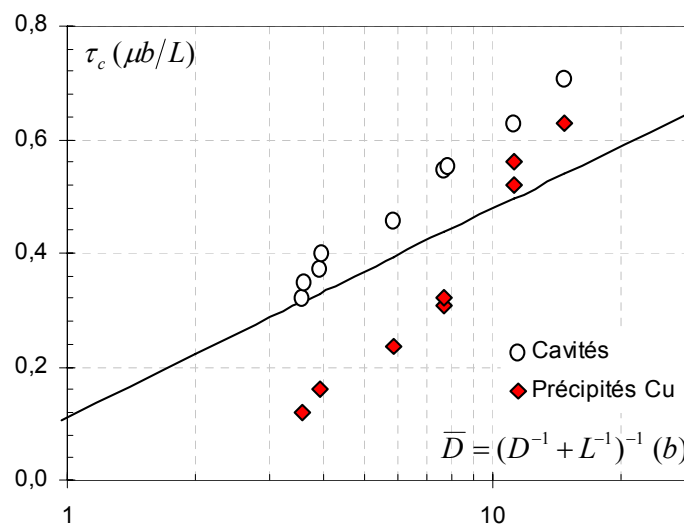


Figure VI.3. Contrainte critique nécessaire à une dislocation coin infinie pour le franchissement d'une rangée périodique d'obstacles en fonction du diamètre harmonique  $\bar{D} = (D^{-1} + L^{-1})^{-1}$ . La droite reprend la relation proposée par Bacon et ses collaborateurs [Bacon *et al.* 1973] dans le cas d'obstacles impénétrables.

Monnet [Monnet 2007] indique que certaines valeurs obtenues dans ce travail sont à considérer avec précaution. En particulier pour les tailles supérieures à 2 nm, des dipôles vis se forment autour des obstacles et ne sont pas mobiles. A 0 K, la force de Peierls utilisée par ces auteurs est largement supérieure aux interactions dipolaires qui ont lieu et stabilise ainsi les

dipôles vis formés.

Les simulations d'Osetsky [Osetsky *et al.* 2003] mettent également en évidence des différences concernant le passage de la dislocation suivant la nature des obstacles avec lesquels elle interagit.

- La dislocation est d'abord attirée par le champ élastique attractif des cavités. A la libération des obstacles, la dislocation absorbe des lacunes par montée et forment ainsi des crans. Le nombre de lacunes absorbées augmente avec la taille des cavités.
- La montée de la dislocation est observée également en présence des précipités de cuivre. Le passage de la dislocation a pour conséquence le changement de structure des gros précipités qui passent d'une structure CC instable à la structure CFC ou 9R suivant leur taille.

### Effet de la température

Dans des simulations un peu plus récentes [Bacon et Osetsky 2004, Osetsky et Bacon 2005], l'influence importante de la température est mise en évidence. L'agitation thermique facilite en effet le passage de ces obstacles aux dislocations. La figure VI.4.a présente l'effet de la température sur la contrainte critique pour franchir une rangée de cavités ou de précipités de cuivre de différentes tailles. Cet effet est différent suivant la taille des précipités de cuivre. L'abaissement semble relativement plus important dans le cas des gros précipités (3 et 4 nm). Pour ces gros précipités, la contrainte semble aussi diminuer continûment jusqu'à 400 K, ce qui n'est pas le cas pour les précipités de 2 nm dont la courbe présente un plateau dès 200 K.

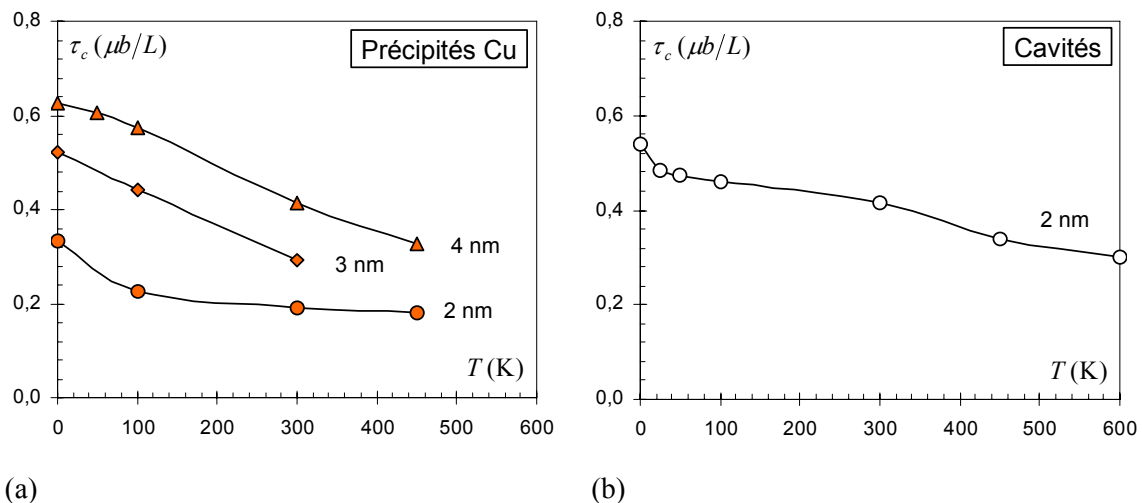


Figure VI.4. Influence de la température sur la cission critique nécessaire au passage d'une dislocation coin au travers d'une rangée périodique d'obstacles : (a) des précipités de cuivre de différentes tailles et (b) des cavités de 2 nm de diamètre.

Bacon et Osetsky [Bacon et Osetsky 2004, Osetsky et Bacon 2005] indiquent également que l'interaction entre la dislocation et les précipités évolue peu avec l'augmentation de la température. Lorsque  $T > 0$  K, la dislocation absorbe moins d'atomes et de lacunes qu'elle ne le fait à 0 K, avec les grandes tailles de précipités. Le changement de structure des précipités après passage d'une dislocation n'est pas aussi clairement identifié.

Il existe moins d'informations pour ce qui concerne les cavités [Bacon et Osetsky 2004, Osetsky et Bacon 2005]. La figure VI.4.b montre l'influence de la température sur la cission critique pour des cavités de 2 nm de diamètre. Les résultats sont semblables à ceux obtenus avec les précipités de cuivre de grandes tailles. La contrainte décroît de manière continue avec l'augmentation de la température. La valeur est divisée quasiment par deux entre 0 et 600 K.

### Les boucles de dislocations

Le cas de l'interaction entre dislocations et petites boucles de dislocations formées par irradiation est plus complexe [Rong *et al.* 2005, Bacon *et al.* 2006, Terentyev *et al.* 2007]. Des travaux de DM reprennent l'approche proposée pour les cavités et les précipités : ces simulations portent sur l'interaction entre une dislocation coin infinie et une rangée périodique de boucles dont la configuration géométrique peut varier. Jusqu'à présent seules les boucles du type  $\frac{1}{2} \langle 111 \rangle \{110\}$  ont fait l'objet de ce type d'études. L'interaction avec ces objets est plus complexe car le mécanisme mis en jeu change suivant le fait qu'il y ait contact ou non :

- sans contact [Rong *et al.* 2005], les boucles sont traînées par les dislocations coins à cause de l'interaction qu'elles exercent l'une sur l'autre. La conséquence de ce mécanisme sur la mobilité de la dislocation est modifiée par différents paramètres. D'une part l'augmentation du diamètre des boucles réduit la mobilité de la dislocation. L'augmentation de la distance séparant les boucles entre elles, ou les séparant du plan de glissement, conduit au même effet. D'autre part, la mobilité de la dislocation est moins affectée lorsque les boucles sont toutes de même vecteur de Burgers que la dislocation.
- Lorsque les boucles intersectent le plan de glissement, la réaction peut conduire à un ancrage relativement important dans le cas de grandes boucles [Bacon *et al.* 2006, Terentyev *et al.* 2007]. Il se forme un segment coin de vecteur de Burgers [010], qui est sessile dans le plan de glissement. Il se crée également un dipôle vis à l'image du mécanisme d'Orowan dans le cas d'obstacles impénétrables. A basse température, la libération de la dislocation se produit par l'annihilation du dipôle vis, alors que, lorsque l'activation thermique est plus importante, la libération est permise par la propagation du segment [010] selon le plan des boucles. Dans ce dernier cas, la boucle est au moins partiellement absorbée par la dislocation. Quelle que soit la température, des interstitiels sont absorbés ce qui conduit à la formation de crans assez longs qui réduisent la mobilité

de la dislocation coin après le passage de la boucle.

Dans ces deux mécanismes, la température joue à nouveau un rôle prépondérant en regard des autres paramètres, en diminuant significativement les contraintes mises en jeu.

## **VI.2. Etude du durcissement des cavités par dynamique de dislocations**

Cette revue de la littérature fait apparaître des différences significatives entre les défauts d'irradiation formés dans les aciers de cuve : ils sont tous de taille nanométrique mais diffèrent largement en densité. Les cavités et les amas de solutés apparaissent comme les plus nombreux, avec une densité de plus de  $10^{23} \text{ m}^{-3}$ . Les boucles de dislocations présentent une densité plus basse d'au moins un ordre de grandeur, autour de  $10^{22} \text{ m}^{-3}$ . Les simulations de DM montrent que les cavités sont des obstacles plus forts au passage des dislocations en comparaison avec les précipités de cuivre de dimensions équivalentes. On peut supposer que les interactions avec les amas d'éléments d'alliage sont plus faibles, dans la mesure où il s'agit d'obstacles dilués.

La définition de l'interaction avec les boucles de dislocations est moins évidente car ce sont des obstacles mobiles et les travaux sont moins nombreux. Le rayon de capture d'une boucle d'irradiation par une dislocation reste indéterminé à l'heure actuelle. De plus, il n'est pas évident que la grande mobilité observée dans le cas du fer pur, soit toujours valable dès lors que les boucles d'interstitiels contiennent des éléments d'alliage. En outre, la réaction avec une dislocation vis n'a pas encore été étudiée. Mais surtout, aucune information n'est disponible concernant les boucles  $\langle 100 \rangle \{100\}$ , qui sont celles observées expérimentalement.

Les cavités apparaissent donc comme une des contributions majeures au durcissement lié à l'irradiation, mais sont également les défauts les mieux caractérisés. C'est pourquoi, la majeure partie de nos efforts se focalise sur ces défauts.

### **VI.2.1. Loi de transition d'échelle**

Une étape clef de notre travail consiste à assurer le lien entre les simulations à l'échelle atomique et à l'échelle mésoscopique. Autrement dit, il s'agit de rendre compte de l'interaction complexe qui se produit entre la dislocation et les cavités dans les simulations de DD. En ce sens, nous allons présenter, dans ce qui suit, une loi de transition d'échelle.

Les simulations réalisées par Osetsky *et al.* [Osetsky *et al.* 2003, Osetsky et Bacon 2005] ont montré que les cavités sont traversées par les dislocations. Par conséquent, nous traitons les cavités comme des particules cisailables dans nos simulations de DD. A l'échelle mésoscopique, le passage de ces obstacles est conditionné par la contrainte de cisaillement  $\tau_s$ , qui est un paramètre de simulation. Il est possible d'en définir une valeur à partir des travaux réalisés par Osetsky *et al.* [Osetsky *et al.* 2003, Osetsky et Bacon 2005]. Pour cela, considérons



une rangée de cavités de diamètre  $D$ , et séparées d'une distance  $L$ , comme schématisée en figure VI.5.

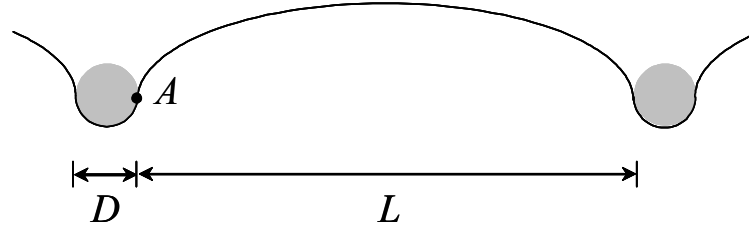


Figure VI.5. Schématisation d'une dislocation infinie arrivant au contact d'une rangée de cavités de diamètre  $D$  séparées d'une distance  $L$ .

Tableau VI.2. Contraintes de cisaillement calculées à l'aide de l'équation VI.1 et des résultats obtenus par Osetsky *et al.* [Osetsky *et al.* 2003], concernant une rangée périodique de cavités de diamètre  $D$  et séparées de deux distances  $L$ .

	$\tau_s$ (GPa)			
	$D = 0,9$ nm	$D = 1$ nm	$D = 1,5$ nm	$D = 2$ nm
$L = 41,4$ nm	5,5	5,7	4,7	4,2
$L = 82,8$ nm	6	6,2	-	4,2

Le point  $A$  est le premier point pour lequel la dislocation n'est plus en contact avec la cavité (*cf.* figure VI.5). En  $A$ , la force appliquée sur la section de dislocation libre entre les deux carbures équilibre la force qu'exerce la cavité sur la section de dislocation qui est devant elle.  $\tau_s$  est la contrainte nécessaire au cisaillement de ces obstacles et  $\tau_{app}$  la contrainte appliquée. Si on schématise par des créneaux les parties de dislocations de part et d'autre du point  $A$ , alors l'équilibre mécanique en  $A$  au moment du cisaillement s'écrit :  $\tau_{app}bL + \tau_s bD = 0$  [Monnet 2004, Mohles 2004]. Ainsi, la loi de transition d'échelle est définie par :

$$\tau_s = \tau_{app} \frac{L}{D} \quad \text{Équation VI.1}$$

On peut donc atteindre à partir de cette relation et des résultats obtenus par Osetsky [Osetsky *et al.* 2003, Bacon et Osetsky 2004, Osetsky et Bacon 2005] la contrainte de cisaillement d'une cavité de diamètre  $D$ . Le tableau VI.2 donne les contraintes  $\tau_s$  calculées de cette manière. Les valeurs données ici se limitent aux diamètres inférieurs à 2 nm. Au-dessus de cette valeur, les cavités ne sont plus cisailées. Le tableau VI.2 montre que (i) la contrainte de cisaillement augmente quand le diamètre des cavités diminue; (ii) pour un même diamètre, les contraintes  $\tau_s$  sont assez similaires pour les deux longueurs, bien que toujours supérieures dans le cas de  $L = 82,8$  nm. En théorie, si la force pour passer une cavité est essentiellement liée à l'énergie de

surface créée par le passage de la dislocation, alors la contrainte  $\tau_s$  devrait être indépendante de la taille de la cavité, ce qui n'est pas le cas dans le tableau VI.2. Une des raisons possibles à cette dépendance est associée à l'incertitude sur le diamètre qui intervient dans la loi de transition donnée en équation VI.1. En effet, comme le montrent les résultats de DM [Osetsky et Bacon 2003], pour les plus grandes cavités les deux parties de la dislocation qui sortent de la cavité (*cf.* figure VI.6.a) sont séparées d'une distance inférieure au diamètre  $D$ . Cependant, il est difficile de corriger le diamètre qui intervient dans l'équation VI.1 pour tenir compte de cet effet. C'est pourquoi on supposera, pour simplifier, que la contrainte de cisaillement ne dépend que du diamètre.

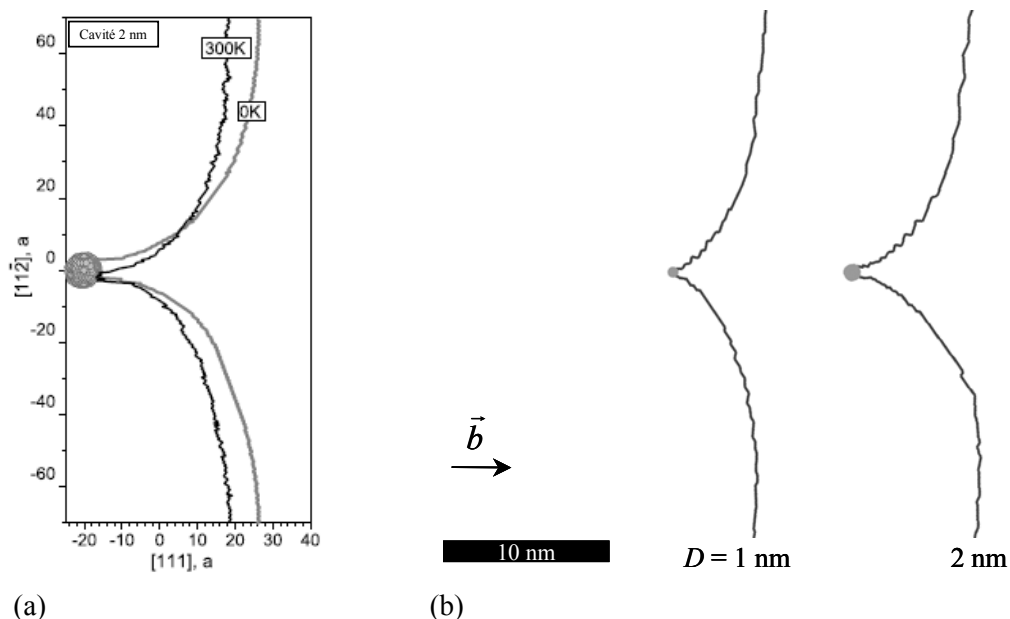


Figure VI.6. (a) Position critique adoptée par la dislocation pour passer une cavité de 2nm, d'après [Osetsky et Bacon 2003]. (b) Courbures critiques simulées par DD juste avant que se produise le passage de cavités de différentes tailles

Il est primordial d'éprouver cette loi de transition d'échelle, avant de pousser plus loin l'étude du durcissement des défauts d'irradiation. Si ces hypothèses de travail sont justes, nous devons être en mesure de retrouver par la DD la contrainte appliquée obtenue par DM pour passer les cavités. Le seul paramètre introduit dans les simulations de DD reste la contrainte de cisaillement  $\tau_s$ . Pour cela, nous allons réaliser des simulations de DD similaires à celles réalisées par Osetsky *et al.* [Osetsky *et al.* 2003]. Pour rappel, elles portent sur une dislocation initialement coin, qui interagit avec une rangée de cavités de même diamètre  $D$  séparées d'une distance  $L$ . les paramètres  $D$  et  $L$  sont variées. Les dimensions du volume de simulation sont choisies de manière à ce que la direction coin coïncide avec une des diagonales du volume. Elle

est assimilable à une dislocation infinie par le jeu des CLP. La dislocation coupe les cavités en leur centre. La longueur de discrétisation est prise comme  $2D$ . Elle est suffisante pour correctement décrire la courbure de la dislocation autour des cavités (par une dizaine de segments). La vitesse de déformation est imposée et il a été vérifié que la consigne choisie n'affecte pas les résultats. Le module de cisaillement du fer utilisé par Osetsky *et al.* [Osetsky *et al.* 2003] est repris, il est égal à 62,5 GPa.

La figure VI.6.b montre l'influence du diamètre des cavités sur la courbure de la dislocation avant que cette dernière ne soit libérée. L'angle que forme la dislocation autour de la cavité se réduit avec l'augmentation du diamètre des cavités, signe qu'il s'agit d'obstacles plus forts. La dislocation arrive tout d'abord au contact de la cavité. Elle se courbe avec l'augmentation de la contrainte appliquée, mais elle pénètre peu la cavité. Une fois la contrainte et donc la courbure critique atteinte, la dislocation traverse la cavité en quelques itérations.

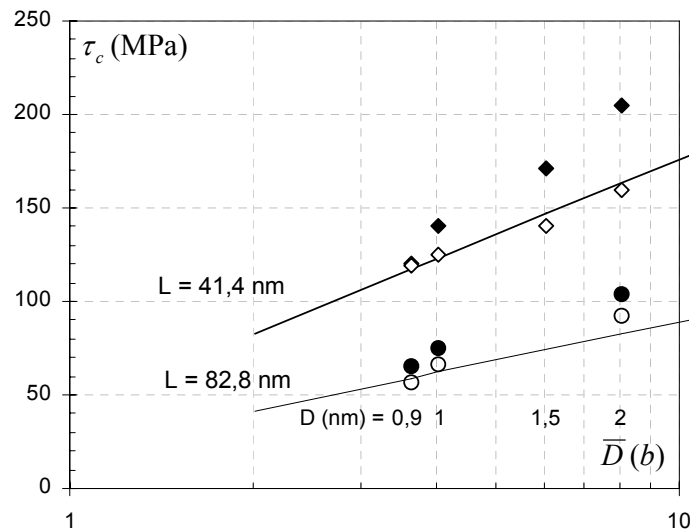


Figure VI.7. Contraintes à appliquer pour traverser une rangée infinie de cavités en fonction du diamètre harmonique  $\bar{D} = (D^{-1} + L^{-1})^{-1}$ . Les simulations de DD, en marques vides, sont comparées aux résultats obtenus par Osetsky *et al.* [Osetsky et Bacon 2003] à l'aide de simulations atomiques. Les droites rappellent le modèle de Bacon [Bacon *et al.* 1973] concernant des obstacles impénétrables.

La figure VI.7 reporte la contrainte critique obtenue par les simulations de DD en fonction du diamètre harmonique  $\bar{D} = (D^{-1} + L^{-1})^{-1}$ . On retrouve le terme logarithmique de la contrainte critique en fonction de  $\bar{D}$ . En revanche, la comparaison avec les résultats obtenus par Osetsky *et al.* [Osetsky *et al.* 2003] fait apparaître certaines différences. L'accord est bon concernant les cavités de diamètres 0,9 et 1 nm. Par contre, la différence avec les résultats de simulations atomiques pour  $L = 41,4$  nm augmente avec les grandes tailles de cavités puisque la pente est clairement inférieure dans le cas des simulations DD. Cette différence atteint 20 % dans le cas

des cavités de 2 nm.

La figure VI.7 reporte également la contrainte nécessaire au passage d'une rangée d'obstacles impénétrables issue du modèle de Bacon *et al.* [Bacon *et al.* 1973]. Les résultats de la DD sont plutôt en bon accord avec ce modèle. Les simulations DD sous estiment donc la force pour les cavités les plus grandes en négligeant la force d'interaction qui existe entre la cavité et la dislocation. On considèrera pour la suite que cette différence, très certainement liée à la raison évoquée précédemment, reste acceptable pour la plupart des tailles et espacement entre cavités.

### VI.2.2. Durcissement induit par la microstructure des cavités

Nous venons d'introduire une loi de transition d'échelle simple qui permet de passer avec un assez bon succès des calculs atomiques aux simulations de DD. La suite logique consiste à utiliser ces résultats dans le but de déterminer la contribution des cavités à la contrainte d'écoulement des aciers de cuve. Ceci est l'objet de la partie suivante.

#### Premier calcul utilisant les forces à 0 K

Pour cela, nous allons reprendre les simulations qui ont permis de déterminer le durcissement associé aux carbures. Une microstructure de dislocations interagit avec une distribution d'obstacles, mais pour réduire le nombre d'interactions mises en jeu, la configuration de dislocations se limite à un seul système actif. Etant donnée la densité importante des cavités, le volume simulé a des dimensions plus réduites que celles utilisées jusque là, avec un côté de 0,8  $\mu\text{m}$ . Le système primaire présente une densité de dislocations élevée de  $2 \cdot 10^{13} \text{ m}^{-2}$ , dont la configuration initiale est construite à partir de huit sources de 0,8  $\mu\text{m}$ , distribuées de manière aléatoire dans l'espace et en caractère. La microstructure des cavités est construite à partir des résultats de DA, correspondant à une irradiation dont la dose est supérieure à celle reçue en fin de vie des cuves [Meslin-Chiffon 2006, Christien et Barbu 2005]. Pour rappel, les conditions d'irradiation sont celles d'un réacteur expérimental belge (BR2), avec un flux de  $1,4 \cdot 10^{-7} \text{ dpaNRT/s}$ . La dose atteinte est de 0,19 dpaNRT à une température de 288 K. Les calculs de DA conduisent à une densité totale de cavités de  $2,1 \cdot 10^{23} \text{ m}^{-3}$ , pour un diamètre moyen de l'ordre de 2 nm. Ainsi, environ  $10^5$  cavités sont présentes dans le volume de simulation. La distribution de taille obtenue par ces auteurs est rappelée en figure VI.8.

Pour rendre plus aisée l'introduction des cavités dans les simulations de DD, la distribution en figure VI.8 est simplifiée. En ce sens, elle est remplacée par un histogramme comptant 5 classes. Parmi elles, deux sont imposées pour reproduire l'allure caractéristique de cette distribution : (i) le pic étroit observé pour un diamètre de 0,6 nm et (ii) le diamètre de 2,2 nm

qui correspond au maximum de la distribution. Les autres classes sont choisies pour reproduire au mieux le reste de la distribution. La densité de chaque classe est établie de manière à conserver la même densité de cavités. Les propriétés de chaque classe de cavités sont reportées dans le tableau VI.3. La force de chaque taille de cavité est obtenue à partir des résultats de DM à 0 K présentés plus haut. Osetsky *et al.* [Osetsky *et al.* 2003] ont en particulier montré que la contrainte pour cisailer les cavités dépendait logarithmiquement du diamètre harmonique. Les contraintes de cisaillement  $\tau_s$  sont calculées par interpolation des résultats obtenus par Osetsky et à l'aide de la loi de transition d'échelle donnée en équation VI.1.

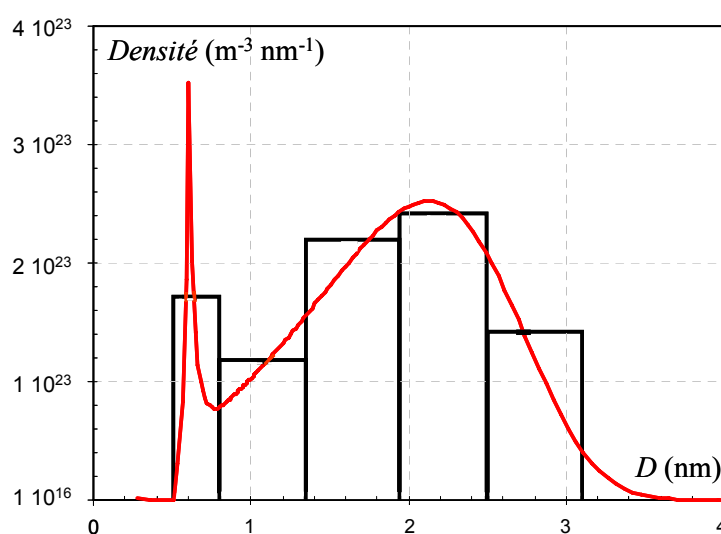


Figure VI.8. Comparaison entre la distribution de taille des cavités obtenue par dynamique d'amas dans le fer et l'histogramme simplifié qui sera utilisé dans les simulations de DD. Le taux de création des défauts est de  $4,3 \cdot 10^{-8}$  dpaNRT/s, à 300 °C, et la dose atteinte est de 0,19 dpaNRT.

Tableau VI.3. Caractéristiques de la distribution de cavités introduite dans les simulations de DD.

Classe	$D$ (nm)	$\rho$ ( $m^{-3} nm^{-1}$ )	$\tau_s$ (GPa)
1	0,6	$1,7 \cdot 10^{23}$	5,7
2	1,08	$1,18 \cdot 10^{23}$	5,4
3	1,62	$2,19 \cdot 10^{23}$	4,7
4	2,18	$2,4 \cdot 10^{23}$	4
5	2,72	$1,41 \cdot 10^{23}$	3,6

Une séquence du déplacement de dislocations au travers de la population de cavités est donnée en figure VI.9. Les dislocations sont relativement peu courbées entre les cavités. Une observation plus minutieuse des microstructures fait apparaître des différences de courbures

suivant le diamètre des cavités intersectées. Les plus grandes sont plus difficilement cisillées. La libération d'une cavité entraîne parfois une succession de libérations secondaires le long de la dislocation. Il est intéressant de noter que le mouvement des dislocations est relativement continu dans la mesure où les cavités les stoppent peu, mais régulièrement. Elles semblent d'ailleurs avancer en blocs, puisqu'elles restent peu courbées.



Figure VI.9. Séquence du mouvement de dislocations au travers une distribution de cavités. L'épaisseur de la lame mince est de 30 nm et a été obtenue sous chargement pour  $\gamma = 0,6\%$ . Le plan d'observation correspond au plan du système primaire. Il faut noter que, compte tenu de l'épaisseur de la lame, un bon nombre de cavités visibles ne coupent pas le plan de glissement des dislocations.

La contrainte d'écoulement est reportée en figure VI.10 et elle est comparée, à titre d'illustration, à la courbe de déformation obtenue dans le cas de l'interaction dipolaire seule, dont nous avons discuté dans le chapitre III. Avec les cavités, la contrainte d'écoulement se présente sous la forme d'un plateau bien défini dès 0,1 % de cisaillement. La contribution des cavités est considérable puisque le niveau de contrainte oscille entre 140 et 150 MPa. En fin de déformation, environ 5000 cavités ont été cisillées. Entre le début du plateau à 0,1 % et la fin de la déformation, la densité du système primaire a augmenté de  $2 \cdot 10^{13}$  à  $10^{14} \text{ m}^{-2}$ . Cette augmentation de densité devrait correspondre à un écrouissage dû aux interactions dipolaires qui n'est pas visible sur la courbe de déformation. En reprenant les résultats qui concernent le mécanisme de la forêt du chapitre III, la contrainte associée à ces interactions  $\tau_{dip} = \mu b \sqrt{\beta_{dip} \rho_1}$  est estimée à 17 MPa en fin de simulation. Or, le chapitre IV a montré que la loi de composition quadratique permettait de bien reproduire la composition de mécanismes aussi différents, en force et en densité, que les interactions avec la forêt et des carbures impénétrables. On va

supposer que cette loi est valable également par la composition entre la contribution des cavités et les interactions dipolaires. La contrainte associée aux cavités seules s'écrit par conséquent :  $\tau_{cav} = (\tau_c^2 - \tau_{dip}^2)^{0,5}$ . **L'application numérique avec  $\tau_c = 110$  MPa (soustraction faite de la friction d'alliage) conduit à estimer  $\tau_{cav}$  à 108 MPa.** Cette valeur assez importante, obtenue pour les forces à 0 K, constitue bien évidemment la contrainte maximum que peuvent induire les cavités, dans la mesure où l'activation thermique va faciliter le passage des cavités.

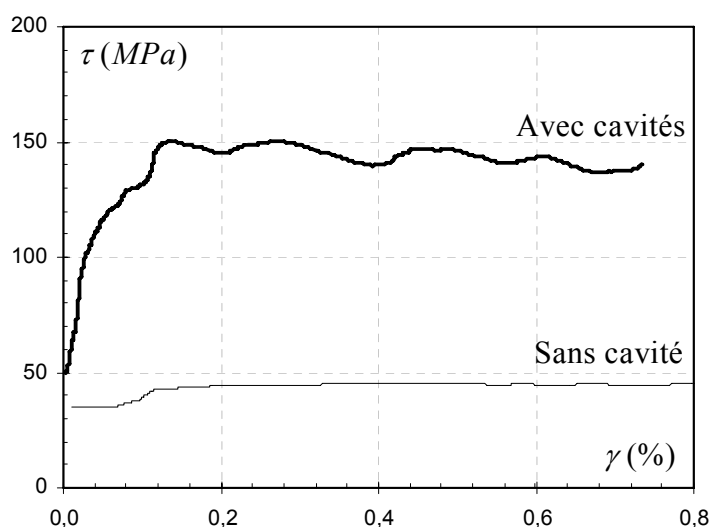


Figure VI.10. Courbe de déformation obtenue lors de la simulation de l'interaction entre un système primaire avec une distribution de cavités. La figure rappelle également la contrainte d'écoulement obtenue au chapitre III, pour l'interaction dipolaire seule.

### Prédiction de la contribution des cavités

Prédire la contrainte induite par une telle distribution est difficile. Il n'existe pas dans la littérature de modèle adapté à la situation la plus complexe d'obstacles multiples, différents en forces et densités, et qui prennent en compte l'aspect aléatoire de la distribution spatiale (*cf.* les revues proposées dans [Brown et Ham 1971, Nembach 1996]). C'est pourquoi, nous allons proposer un nouveau modèle à partir du seul indicateur de la force de chaque classe de cavités qui est la contrainte  $\tau_s^i$ . Ce modèle sera ensuite validé par la comparaison avec les résultats de la simulation. La force moyenne  $F^i$  pour cisailer des cavités d'une même classe  $i$  s'écrit  $F^i = \tau_s^i b D_{eff}^i$  et fait intervenir le diamètre effectif des cavités  $D_{eff}^i = (\pi/4) D^i$  [Nembach 1996]. Ce diamètre est inférieur à celui des cavités  $D^i$ , puisque le plan de glissement des dislocations ne coupe pas toujours le centre des cavités. Cette force est équilibrée par celle nécessaire pour courber une dislocation entre deux cavités. Suivant les développements désormais classiques

(cf. [Brown et Ham 1971, Nembach 1996]), cette dernière est liée à la tension de ligne de la dislocation pondérée par un coefficient  $\beta^i$  :

$$F^i = \tau_s^i b \frac{\pi D^i}{4} = \beta^i \mu b^2 \ln \left( \frac{l^i}{r_0} \right) \quad \text{Équation VI.2}$$

Le coefficient  $\beta^i$  mesure en quelque sorte la force moyenne des cavités de cette classe. Le terme logarithmique fait apparaître les deux rayons de coupures :  $l^i = (\rho^i)^{-0,5}$ , la distance moyenne entre les cavités d'une densité surfacique  $\rho^i$ , et le rayon inférieur  $r_0$  pris égal à  $b$ . La densité  $\rho^i$  est estimée à partir de la densité volumique  $N^i$  à partir de  $\rho^i = D^i N^i$  [Nembach 1996]. L'équation VI.2 permet de définir une relation simple entre le coefficient  $\beta^i$  et la contrainte de cisaillement de cette classe de cavité :

$$\beta^i = \frac{\tau_s^i \pi D^i}{4 \mu b \ln(l^i/r_0)} \quad \text{Équation VI.3}$$

Comme le montre le tableau VI.4, les classes de cavités présentent des densités et des forces différentes. Afin de prédire la superposition des contributions de chaque classe de cavités nous allons reprendre l'approche proposée par Foreman et Makin [Foreman et Makin 1967] et utilisée par Monnet [Monnet 2006], qui consiste à définir un coefficient d'interaction moyen  $\beta^{tot}$  qui s'écrit :

$$\beta^{tot} = \sum_i \frac{\rho^i \beta^i}{\rho^{tot}} \quad \text{Équation VI.4}$$

Où  $\rho^{tot}$  est la densité totale. Finalement la contrainte d'écoulement  $\tau_c$  associée à la distribution entière de cavités se formule ainsi :

$$\tau_c = 0,8 \beta^{tot} \frac{\mu b}{l^{tot}} \ln \left( \frac{l^{tot}}{r_0} \right) \quad \text{Équation VI.5}$$

$l^{tot}$  est la distance moyenne entre les cavités et est égale à  $(\rho^{tot})^{-0,5}$ . Cette relation diffère des modèles précédents par deux aspects [Foreman et Makin 1967]. On retrouve le facteur 0,8 introduit par Kocks [Kocks 1967] et Foreman et Makin [Foreman et Makin 1966] pour tenir compte de la différence entre la distance effective séparant des obstacles et la grandeur définie par  $(\rho^{tot})^{-0,5}$  valable dans le cas d'un réseau carré de cavités. Et d'autre part, la prise en compte du terme logarithmique de l'énergie de ligne qui s'avère ici nécessaire. Finalement, les résultats de ce modèle sont reportés dans le tableau VI.4. La contrainte  $\tau_c$  prédite de cette manière est de 100 MPa, elle est plutôt en bon accord avec la valeur de 108 MPa obtenue par simulation. Cela justifie a posteriori le modèle développé ici.

Cette partie est également l'occasion de discuter la contribution relative des différentes classes de cavités. En ce sens, l'équation VI.4 est reprise, à la différence près que les densités et le coefficient d'interaction correspondent cette fois à une seule classe de cavités. Comme cela



était attendu, la majeure contribution  $\tau_c^i$  provient des cavités de plus grandes tailles (cf. tableau VI.4). Les cavités de taille inférieure à 1,6 nm sont pratiquement négligeables en regard des autres contributions à la contrainte totale. Et la contribution  $\tau_c^i$  la plus élevée est obtenue pour les cavités de 2,1 et 2,7 nm qui sont à la fois parmi les obstacles les plus forts et les plus nombreux. Il est intéressant de noter que la loi quadratique qui a donnée de bons résultats concernant la superposition du mécanisme de la forêt et d'Orowan donne ici aussi de bons résultats. Partant des contraintes  $\tau_c^i$  de chaque classe de cavités, il suit de la loi quadratique une contrainte totale de 105 MPa, qui est de nouveau assez proche des résultats de la simulation.

Tableau VI.4. Valeurs des différents paramètres qui interviennent dans le modèle proposé ici, pour les différentes classes de cavités et pour la distribution complète.

Classe n° $i$	1	2	3	4	5	<b>Totale</b>
$D^i$ (nm)	0,6	1,08	1,62	2,16	2,72	
$\rho^i$ ( $10^{13} \text{ m}^{-2}$ )	1	3,5	9,8	14,3	10,6	<b>39,1</b>
$l^i$ (nm)	313	169	101	84	97	<b>50</b>
$\beta^i$	0,018	0,034	0,048	0,057	0,063	<b>0,053</b>
$\tau_c^i$ (MPa)	7	22	47	65	64	<b>100</b>

### Effet de la température

Compte tenu de l'aspect nanométrique de la taille des cavités et des résultats de DM présentés plus haut, il est important de déterminer l'effet de la température sur la contribution associée à ces défauts d'irradiation. Pour cela, de nouvelles simulations sont réalisées en faisant varier la température. La manière dont est traitée l'activation thermique dans nos simulations de DD et la détermination de l'énergie d'activation associée au passage des cavités, ont été proposées par Monnet et feront l'objet d'une publication à venir [Monnet 2007]. On retiendra simplement que l'activation thermique est prise en compte via un formalisme stochastique. Cette solution est très similaire à celle déjà utilisée pour le glissement dévié des matériaux CFC. La densité de cavités est telle, que la distance caractéristique associée (50 nm) est inférieure d'un ordre de grandeur à celle du mécanisme de la forêt. Les volumes considérés sont donc réduits pour limiter le nombre de cavités introduites. Il est difficile dans ces conditions de construire une microstructure réaliste de dislocations. Dans la partie précédente, la configuration se limitait à quelques sources. Par souci de simplicité et puisqu'il n'est pas possible de construire une microstructure plus réaliste de dislocations, les simulations avec activation thermique portent sur une dislocation mixte infinie. Ces simulations présentent l'avantage d'être bien plus facile à mettre en œuvre et bien moins coûteuse en temps de calcul. Cette solution

permet également de s'affranchir des problèmes liés aux interactions dipolaires qui peuvent induire une contribution non négligeable de la contrainte d'écoulement. Le volume de simulation présente désormais un côté de  $0,5 \mu\text{m}$ . L'histogramme simplifié et les densités des cavités sont repris de la simulation précédente. Il a été vérifié, au préalable, que l'orientation initiale de la dislocation infinie n'affecte pas les résultats.

La prise en compte de l'activation thermique introduit une dépendance sur la vitesse de déformation. Dans un premier temps plusieurs vitesses de déformation ont été utilisées afin de faire varier la vitesse moyenne  $\bar{v}$  des dislocations sur une plage couvrant  $0,01$  à  $1 \text{ m/s}$ , à une température de  $300\text{K}$ . Toutes les courbes de déformation se présentent sous la forme d'un plateau, puisqu'aucun mécanisme d'écrouissage n'est possible. Un exemple est donné en figure VI.11.a pour une vitesse de dislocations de  $0,01 \text{ m/s}$ . La courbe est assez bruitée (avec des oscillations de  $15 \text{ MPa}$ ) à cause des événements d'arrêts et de libérations de la dislocation. Les courbes obtenues pour les autres vitesses de dislocations sont tout aussi bruitées, mais la contribution due aux cavités ne semble pas être affectée par la vitesse. La contrainte d'écoulement reste, en effet, autour de  $70 \text{ MPa}$ . Cette insensibilité à la vitesse peut paraître surprenante, elle s'explique probablement par l'erreur relative assez grande.

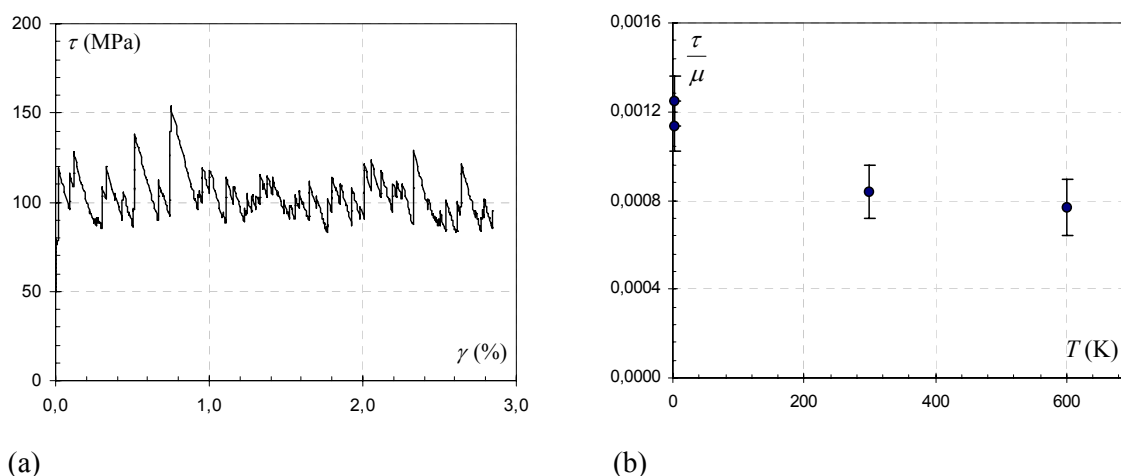


Figure VI.11. (a) Courbe de déformation associée à l'interaction avec une distribution de cavités, obtenue à  $300 \text{ K}$  et pour une vitesse moyenne  $\bar{v}$  des dislocations de  $0,1 \text{ m/s}$ . (b) Influence de la température  $T$  sur la contrainte associée à une distribution de cavités. La vitesse des dislocations est fixée à  $0,1 \text{ m/s}$ .

Dans un second temps, l'influence de l'activation thermique est étudiée en fixant la vitesse moyenne de la dislocation à  $0,1 \text{ m/s}$ , alors que la température varie entre  $0$  et  $600 \text{ K}$ . Afin de s'affranchir de la dépendance en température du module de cisaillement, les résultats présentés en figure VI.11.b sont rapportés à  $\mu$ . Ce dernier prend les valeurs de  $89$ ,  $83,6$  et  $78,2 \text{ GPa}$  pour les températures respectives de  $0$ ,  $300$  et  $600 \text{ K}$ . Comme cela avait été obtenu par DM [Osetsky

*et al.* 2003], les résultats montrent que la contrainte d'écoulement est fortement abaissée avec l'augmentation de la température. La diminution de l'ordre de 30 % est d'ailleurs bien plus forte entre 0 et 300 K, que sur le domaine 300 - 600 K. Malgré l'effet de l'activation thermique, la contrainte d'écoulement associée aux seules cavités reste significative. Soustraction faite de la friction d'alliage, elle représente 70 MPa à 300 K et 65 MPa soit un peu moins à 600 K.

### VI.2.3. Vers une description complète de l'état irradié

#### Composition avec les autres mécanismes de durcissement

Faute de temps, la composition entre l'interaction avec les cavités et les mécanismes de durcissement présents avant irradiation n'a pu être étudiée à l'aide des simulations de DD. Néanmoins, cet exercice aurait été certainement difficile dans la mesure où les échelles physiques de ces mécanismes sont assez dissemblables. La forêt et les carbures sont plutôt associés à un espacement caractéristique de l'ordre de 0,5  $\mu\text{m}$ , tandis que les cavités sont séparées d'une cinquantaine de nanomètres. Ensuite, la force de la forêt ou des carbures est assez différente de celle des cavités. Ceci complique encore la discussion puisqu'il s'agit du cas de superposition entre des mécanismes, à la fois de forces et de densités diverses, qui est le plus difficile à prédire [Brown et Ham 1971]. En revanche, un des résultats importants du chapitre IV, est de montrer que la loi proposée par Franciosi *et al.* [Franciosi *et al.* 1981], basée sur une loi quadratique, reproduit bien la superposition de mécanismes aussi différents que les diverses interactions avec la forêt et les carbures. A défaut de plus d'information, on pourra supposer que cette loi prédit correctement la superposition de tous ces mécanismes. Poursuivant cette idée, la contrainte d'écoulement de la ferrite à l'état irradié s'écrit :

$$\tau_c = \sqrt{\tau_{\text{forêt}}^2 + \tau_{\text{carbures}}^2 + \tau_{\text{confinement}}^2 + \tau_{\text{cavités}}^2} + \tau_F \quad \text{Équation VI.6}$$

Elle fait apparaître la contribution de chacun des mécanismes qui sont mis en jeu ici. Les chapitres précédents ont montré que la contrainte liée à la forêt est égale à 80 MPa à la température ambiante (en tenant compte du glissement dévié). Les carbures conduisent, quant à eux, à une contrainte de 38 MPa. Le confinement des dislocations entre les parois des lattes conduit à une valeur de 10 MPa (qui peut être négligée *cf.* chapitre IV). Ensuite nous avons vu précédemment que les cavités représentent une contrainte de 70 MPa à 300 K dans les conditions d'irradiation précisées plus haut. Ainsi la contrainte d'écoulement passe de 120 MPa dans l'état non irradié, à 143 MPa avec l'introduction des cavités. Cela représente une augmentation de près de 20 %.

#### La contribution des cavités au durcissement total d'irradiation

Il est à présent possible de comparer nos résultats aux mesures expérimentales du

durcissement par irradiation dans les aciers de cuve, afin d'estimer la contribution relative des cavités. Cette entreprise demeure difficile pour de multiples raisons. D'abord les caractéristiques mécaniques, y compris à l'état non irradié des aciers de cuve, fluctuent de manière significative suivant la coulée notamment à cause des dimensions et de la complexité de la microstructure (*cf.* chapitre I). A titre d'exemple, la limite élastique conventionnelle, prise à 0,2 % de déformation, doit être supérieure à 400 MPa comme l'impose la norme RCCM relative aux matériaux du nucléaire. Les données expérimentales montrent qu'elle est comprise, en pratique, entre 420 et 560 MPa [Bertin 2001]. Ensuite et nous l'avons montré au début de ce chapitre, les conditions d'irradiation peuvent affecter la microstructure d'irradiation obtenue et donc le comportement mécanique mesuré. Enfin, le passage du comportement du monocristal de ferrite à celui du matériau polycristallin est inconnu. D'une manière générale, la contrainte nécessaire pour déformer un polycristal s'écrit [Hall 1951, Petch 1953] :

$$\sigma = M\tau_c + \frac{k_{HP}}{\sqrt{d}} \quad \text{Équation VI.7}$$

On retrouve la cission critique du monocristal, pondérée par le facteur de Taylor  $M$ . Le second terme traduit les effets d'échelles associés aux joints de grains, ces derniers ayant une taille moyenne  $d$ . Et  $k_{HP}$  est le facteur de Hall-Petch [Hall 1951, Petch 1953]. Pour éviter des hypothèses incertaines, il est préférable de porter la discussion sur les incréments de contrainte dus à l'irradiation, tant sur la cission critique du monocristal que sur la limite élastique du polycristal. Et si l'on suppose que les effets d'échelles restent identiques avant et après irradiation, on suppose simplement que :

$$\frac{\Delta\sigma}{\sigma} = \frac{\Delta\tau_c}{\tau_c} \quad \text{Équation VI.8}$$

Avec  $\Delta\sigma$  et  $\Delta\tau_c$  les incréments respectifs de contraintes du polycristal et du monocristal liés aux défauts d'irradiation. La figure VI.12 reporte les mesures expérimentales de la limite élastique de la nuance française d'acier de cuve, avant et après irradiation, en fonction de la température de sollicitation [Bertin 2001]. L'irradiation a été effectuée au sein d'un réacteur expérimental (Osiris), à une température de 288 K, avec une dose atteinte de  $7 \cdot 10^{19}$  n/cm<sup>2</sup> ( $E > 1$  MeV) soit un peu moins de 0,1 dpaNRT.

La figure VI.12 montre que : (i) tout d'abord la dispersion de la limite élastique des aciers de cuve que cela soit avant ou après irradiation, (ii) ensuite les limites élastiques diminuent avec la température, mais de manière différenciée avant et après irradiation, c'est pourquoi (iii) l'écart entre les états avant et après irradiation augmente avec la température de sollicitation. On définit l'incrément de contrainte  $\Delta\sigma$ , à l'ambiante, à partir des moyennes sur les différentes valeurs obtenues à l'état irradié (569 MPa) et non irradié (454 MPa). Il vaut ici 115 MPa. Finalement l'incrément relatif  $\Delta\sigma/\sigma$  expérimental est égal à 25 %. Les résultats de nos simulations de DD

ont montré que la contrainte d'écoulement  $\tau_c$  passe de 120 MPa à l'état non irradié, à 143 MPa en tenant compte de la présence des cavités. On a donc obtenu sur l'ensemble de nos simulations de DD, un incrément de cission relatif  $\Delta\tau_c/\tau_c$  égal à 20 %, ce qui est très proche de la valeur expérimentale de  $\Delta\sigma/\sigma$ .

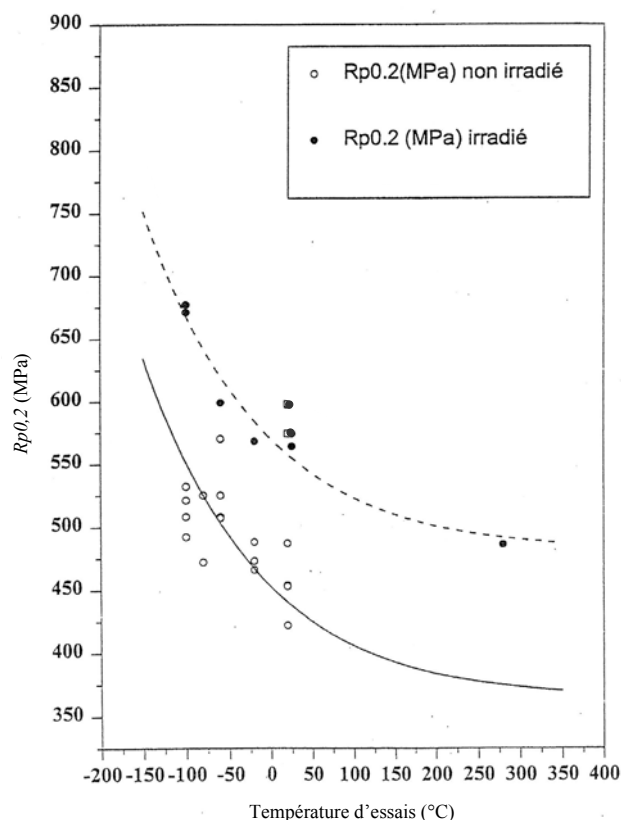


Figure VI.12. Effet de la température sur la limite élastique conventionnelle ( $Rp0,2$ ) avant et après irradiation de l'acier 16MND5 [Bertin 2001].

Quelques remarques préliminaires s'imposent avant de conclure sur ce point :

- Tout d'abord la dose (équivalente approximativement à 0,1 dpaNRT) étudiée par Bertin est inférieure à celle utilisée par Barbu (0,19 dpaNRT) pour définir la distribution de cavités que nous avons utilisée dans nos simulations de DD. En toute rigueur, la densité que nous avons utilisée dans nos simulations est probablement supérieure à celle présente dans les expériences de Bertin. Néanmoins nous avons vu que la densité de défauts sature avec la fluence (*cf.* figure VI.1). L'ordre de grandeur de  $10^{23} \text{ m}^{-3}$  est probablement toujours valable.
- Ensuite, la composition entre l'interaction avec les cavités et les autres mécanismes présents (la forêt et Orowan) est pour le moment basée sur une hypothèse de travail.

Néanmoins, la composition avec les cavités doit donner un incrément de contrainte non négligeable, puisque la contrainte associée aux cavités seules est du même ordre que la contribution de la forêt. De plus, la loi quadratique est celle qui atténue le plus les effets de mécanismes de durcissements lors de leur superposition.

A partir des résultats expérimentaux et par une démarche inverse, on estime la cission critique à l'état irradié à 150 MPa, en tenant compte de l'ensemble de la microstructure irradiée. De la même manière, on suppose que la loi quadratique est toujours valable pour la superposition de tous les défauts d'irradiation et des mécanismes associés à l'état non irradié. Ainsi pour avoir une contrainte d'écoulement totale à hauteur de 150 MPa, il faut ajouter une contribution de 40 MPa, qui correspond à la contribution totale des boucles et de tous les amas, Cu compris. Finalement, nos simulations démontrent clairement que les cavités représentent le mécanisme d'écrouissage d'irradiation prépondérant dans les aciers de cuve.

### Résumé

---

Tout d'abord, une revue de la littérature, assez conséquente, sur l'irradiation des aciers de cuve a mis en évidence un certain nombre de points :

le rayonnement neutronique donne naissance à quatre défauts d'irradiation dans ces aciers : des amas de solutés relativement dilués, des précipités de Cu, des boucles de dislocations et des cavités.

Tous ces objets de taille nanométrique, diffèrent en densité. Les amas de solutés et les cavités sont les plus nombreux avec une densité comprise entre  $10^{23}$  et  $10^{24}$  m<sup>-3</sup>. Les boucles et les précipités présentent, quant à eux, une densité inférieure d'un ordre de grandeur.

Les défauts d'irradiation diffèrent également en force. L'interaction avec les cavités est la plus étudiée. Elles ancrent beaucoup plus les dislocations que les précipités de Cu. L'interaction avec un seul type de boucles a été étudié par DM et s'avère complexe.

Notre travail se focalise sur les cavités qui semblent constituer une contribution non négligeable au durcissement total par irradiation. Pour cela une loi de transition de l'échelle microscopique à celle mésoscopique est proposée afin d'établir le lien entre les résultats des simulations atomiques, et la contrainte nécessaire pour cisailer les cavités dans les simulations de DD.

Le durcissement des cavités est déterminé par simulations de DD qui portent sur une microstructure d'irradiation. Celle-ci est issue des calculs de dynamique d'amas pour des conditions similaires à celles de fonctionnement des cuves. Nous avons proposé un modèle qui permet de prédire la contrainte d'écoulement associée à une distribution de cavités à partir de la seule force individuelle de ces obstacles. La température affecte de manière significative la contrainte d'écoulement obtenue. Finalement, la contrainte associée aux interactions avec les cavités est considérable et s'apparente à la majeure contribution au durcissement total d'irradiation.

---

---

**Bibliographie**

- [Almazouzi 2006] A. Almazouzi, rapport P109 projet PERFECT (2006).
- [Arakawa *et al.* 2004] K. Arakawa, M. Hatanaka, H. Mori, K. Ono, J. Nucl. Mater. **329-333**, 1194 (2004).
- [Auger *et al.* 1994] P. Auger, P. Pareige, M. Akamatsu, J. C. Van Duysen, J. Nucl. Mater. **211**, 194 (1994).
- [Auger *et al.* 2000] P. Auger, P. Pareige, S. Welzel and J-C. Van Duysen J. of Nucl. Mater. **280**, 331 (2000).
- [Bacon *et al.* 1973] D. J. Bacon, U. F. Kocks, R. O. Scattergood, Phil. Mag. **28**,1241 (1973).
- [Bacon *et al.* 2006] D. J. Bacon, Y. N. Osetsky, Z. Rong, Phil. Mag. **86**, 3921 (2006).
- [Bacon et Osetsky 2004] D. J. Bacon, Y. N. Osetsky, J. Nucl. Mater. **329-333**, 1233 (2004).
- [Barbu 2007] A. Barbu, communication personnelle (2007).
- [Bedzikian 1997] G. Bedzikian, Tenue en service des cuve des tranches REP 900 MWe. Dossier de synthèse, D4002-42-10/97-0676Z (1997).
- [Bertin 2001] J. L. Bertin, note CEA NT SRMA 01-2411 (2001).
- [Brown et Ham 1971] dans A. Kelly and R.B. Nicholson, éditeurs, Strengthening Methods in Solids, chapter 2, pages 9–135. Applied Science Publishers, Barking, Essex (UK), 1971
- [Buswell *et al.* 1995] J. T. Buswell, W. J. Phythian, R. J. McElroy, S. Dumbill, P. H. N. Ray, J. Mace, R. N. Sinclair, J. Nucl. Mater. **225**, 196 (1995).
- [Christien et Barbu 2004] F. Christien, A. Barbu, J. Nucl. Mater. **324**, 90 (2004).
- [Domain et Monnet 2005] C. Domain, G. Monnet, Phys. Rev. Lett. **95**, 215506 (2005).
- [Eldrup *et al.* 2002] M. Eldrup, B.N. Singh, S.J. Zinkle, T.S. Byun, K. Farrell, J. Nucl. Mater. **307-311**, 912 (2002).
- [Eldrup et Singh 2003] M. Eldrup, B. N. Singh, J. Nucl. Mater. **323**, 346 (2003).
- [English *et al.* 1980] C.A. English, B.L. Eyre and S.M. Holmes, J. Phys. F: Met. Phys. **10**, 1065 (1980).
- [English *et al.* 1990] C. A. English, S. M. Murphy, J. M. Perks, J. Chem. Soc. Faraday Trans., **86**, 1263 (1990).
- [Faulkner *et al.* 2005] R. G. Faulkner; R. B. Jones; L. Zheng; P. E. J Flewitt, Phil. Mag. **85**, 2065 (1990).
- [Franciosi *et al.* 1981] P. Franciosi, M. Berveiller, A. Zaoui, Acta Metall. **28**, 273 (1981).
- [Fujii et Fukuya 2004] K. Fujii, K. Fukuya, J. Nucl. Mater. **336**, 323 (2005).
- [Ghoniem *et al.* 2002] N.M. Ghoniem, S.H. Tong, J. Huang, B.N. Singh, M. Wen, J. Nucl.

- Mater. **307-311**, 843 (2002).
- [Ghosh et Olson 2002] G. Ghosh, G. B. Olson, Acta Mater. **50**, 2655 (2002).
- [Hall 1951] E. Hall, Proc. Phys. Society **B64**, 747 (1951).
- [Horiki *et al.* 1999] M. Horiki, T. Yoshiie, M. Iseki, M. Kiritani, J. Nucl. Mater. **271-272**, 256 (1999).
- [Horiki *et al.* 2000] M. Horiki, T. Yoshiie, Q. Xu, M. Iseki, M. Kiritani, J. Nucl. Mater. **283-287**, 282 (2000).
- [Jumel et al. 2000] S. Jumel, C. Domain, J. Ruste, J. C. Van Duysen, C. Becquart, A. Legris, P. Pareige, A. Barbu, V. Pontikis, J. Phys. IV **10**, 191 (2000).
- [Kočík *et al.* 2002] J. Kočík, E. Keilová, J. Čížek, I. Procházka, J. Nucl. Mater. **303**, 52 (2002).
- [Kuleshova *et al.* 2005] E.A. Kuleshova, B.A. Gurovich, Y.I. Shtrombakh, Y.A. Nikolaev, V.A. Pechenkin, J. Nucl. Mater. **342**, 77 (2005).
- [Marian et Wirth 2002] J. Marian and B.D. Wirth, Phys. Rev. Let. **88**, 255507 (2002)
- [Meslin-Chiffon 2007] E. Meslin-Chiffon, Thèse de Doctorat de l'Université de Rouen (2007)
- [Miller *et al.* 2006] M.K. Miller, R.K. Nanstad, M.A. Sokolov, K.F. Russell, J. Nucl. Mater **351**, 216 (2006).
- [Miller et Burke 1992] M. K. Miller, M. G. Burke, J. Nucl. Mater. **195**, 68 (1992)
- [Miller et Russell 2007] M. K. Miller, K. F. Russell, J. Nucl. Mater **371**, 145 (2007).
- [Mohles 2004] V. Mohles, Mat. Sci. Eng. **A365**, 144 (2004).
- [Monnet 2006] G. Monnet, Phil. Mag. **86**, 5927 (2006).
- [Monnet 2007] G. Monnet, Acta Mater. **55**, 5081 (2007).
- [Nembach 1996] . Nembach, dans "Particle strengthening of metals and alloys", New York, Wiley (1996).
- [Odette *et al.* 2001] G.R. Odette, B.D. Wirth, D.J. Bacon, and N.M. Ghoniem, MRS Bulletin, 176 (2001).
- [Osetsky *et al.* 1997] Y.N. Osetsky, M. Victoria, A. Serra, S.I. Golubov, V. Priego, J. Nucl. Mater. **251**, 34 (1997).
- [Osetsky et Bacon 2003] Y.N. Osetsky, D.J. Bacon, J. Nucl. Mater. **323**, 268 (2003).
- [Osetsky et Bacon 2005] Y.N. Osetsky, D.J. Bacon, Mat. Sci. Eng. **A400-401**, 374 (2005).
- [Pareige 1994] P. Pareige, Thèse de doctorat de l'Université de Rouen (1994).
- [Pareige *et al.* 2006] P. Pareige, B. Radiguet, A. Barbu, J. Nucl. Mater. **352**, 75 (2006).
- [Petch 1953] N. J. Petch, J. Iron Steel Inst. **74**, 25 (1953).
- [Phythian *et al.* 1995] W. J. Phythian, R. E. Stoller, A. J. E. Foreman, A. F. Calder, D. J. Bacon, J. Nucl. Mater. **223**, 245 (1995).



- [Radiguet *et al.* 2007] B. Radiguet, A. Barbu, P. Pareige, J. Nucl. Mater. **360**, 104 (2007).
- [Rong *et al.* 2005] Z. Rong, D. Bacon, Y. Osetsky, Mater. Sci. Eng. **A400-401**, 378 (2005).
- [Stoller *et al.* 1997] R.E. Stoller, G. R. Odette, B. D. Wirth, J. Nucl. Mater. **251**, 49 (1997).
- [Terentyev *et al.* 2007] D. Terentyev, L. Malerba, D. J. Bacon, Y. N. Osetsky, J. Phys. Condens. Matter **19**, sous presse (2007).
- [Vincent 2006] E. Vincent, thèse de doctorat de l'Université de Lille (2006).
- [Vincent *et al.* 2006] E. Vincent, C.S. Becquart, C. Domain, J. Nucl. Mater. **359**, 227 (2006).
- [Vincent *et al.* 2007] E. Vincent, C.S. Becquart, C. Pareige, P. Pareige, C. Domain, J. Nucl. Mater., sous presses (2007).
- [Wirth *et al.* 2000] B.D. Wirth, G.R. Odette, D. Maroudas, G.E. Lucas, J. Nucl. Mater. **276**, 33 (200).
- [Zbib *et al.* 2000] H. M. Zbib, T. Diaz de la Rubia, M. Rhee, J. P. Hirth, J. Nucl. Mater. **276**, 154 (2000).
- [Zinkle et Singh 2006] S.J. Zinkle, B.N. Singh, J. Nucl. Mater. **351**, 269 (2006).



---

## CONCLUSION GENERALE

---

Ce travail de recherche a porté sur la caractérisation du comportement mécanique des aciers de cuve à l'échelle mésoscopique. La Dynamique de Dislocations (DD) apparaît comme une technique indispensable à l'établissement, sur une base physique, d'une loi d'écoulement cristallin. Pour les besoins de ce travail, nous avons apporté un certain nombre de développements au code de DD microMégas. Celui-ci a été modifié pour traiter un matériau de structure CC. Seuls les systèmes  $\frac{1}{2} \langle 111 \rangle \{110\}$  sont considérés dans cette étude. Un critère de déviation mécanique est introduit pour permettre le glissement dévié de la dislocation de caractère vis sur deux plans  $\{110\}$  adjacents. Nous avons réécrit le module opérant la détection des obstacles, afin de permettre une meilleure lisibilité du programme. Les précipités ont été introduits explicitement dans le volume de simulation sous forme de sphères, ce qui rend compte de la distribution réelle et de la taille finie de ces obstacles. Ces modifications se sont accompagnées d'un gain significatif de temps de calcul.

A l'état non irradié, nos simulations montrent que la contrainte maximale d'écoulement  $\tau_c$  dans la latte de ferrite des aciers de cuve est d'environ 120 MPa. Elle se décompose en quatre contributions distinctes, dont les valeurs individuelles sont reportées dans la figure 1(a).

- 1) La plus forte contribution est fournie par les interactions entre dislocations. Cette valeur est obtenue en considérant une densité de dislocations proche de  $10^{14} \text{ m}^{-2}$ , confirmée par les observations expérimentales sur cet acier et répartie uniformément sur les douze systèmes de glissement  $\frac{1}{2} \langle 111 \rangle \{1\bar{1}0\}$ . Les interactions prédominantes sont celles qui conduisent aux réactions de cœur des dislocations. Parmi celles-ci, la réaction colinéaire (entre systèmes de même vecteur de Burgers) est nettement plus forte que les jonctions et joue un rôle particulier dans le comportement plastique.

- 2) Vient ensuite, la contribution associée aux carbures intra-latte. Le glissement des dislocations s'opère selon le mécanisme d'Orowan. Le modèle de Bacon *et al.* (1973) pour le mécanisme d'Orowan permet de bien reproduire le durcissement simulé, dans la mesure où il tient compte à la fois des effets de la distribution aléatoire, et des interactions dipolaires. Nos simulations mettent en avant l'écroutissage important associé au stockage de boucles d'Orowan autour des carbures.
- 3) Les éléments d'alliage en solution solide dans la matrice ferritique, principalement les atomes de carbone interstitiels, restreignent la mobilité des dislocations. Nous avons rendu compte de cet effet via une contrainte seuil au déplacement des dislocations. La valeur de cette friction d'alliage est déterminée à partir de résultats expérimentaux sur des monocristaux de fer contenant différents teneurs en carbone.
- 4) Enfin, comme il n'existe pas à l'heure actuelle de caractérisation expérimentale satisfaisante des interfaces inter-lattes, leur rôle est discuté moyennant certaines hypothèses simplificatrices. La configuration la plus sévère revient à considérer les lattes comme des régions hermétiques. A petites déformations, le confinement des dislocations à l'échelle des lattes donne lieu à une contrainte pratiquement négligeable en regard des autres mécanismes déjà présents.

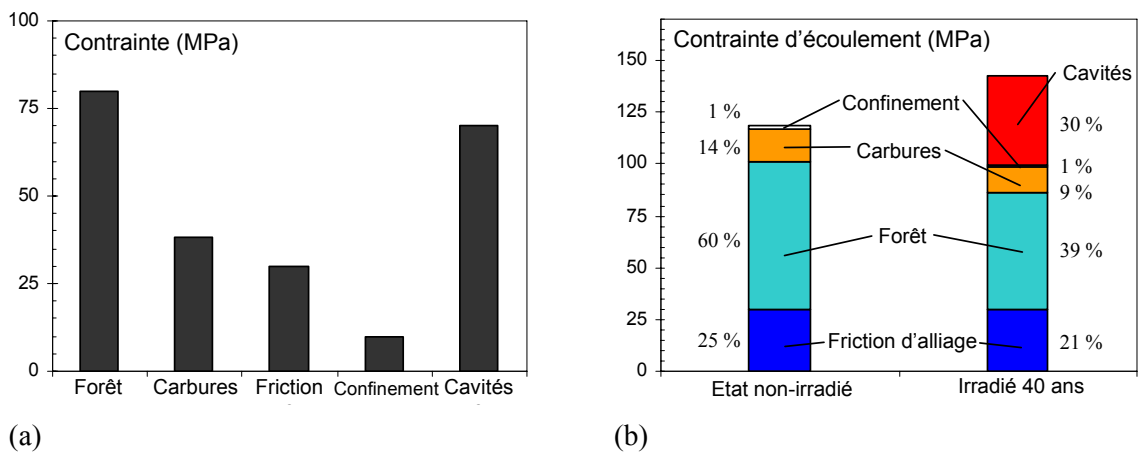


Figure 13. (a) Comparaison des différentes contributions à la contrainte d'écoulement pour une déformation de 0,2 %, obtenues séparément au cours de ce travail. (b) Superposition des différents mécanismes qui définissent la contrainte d'écoulement des états irradié et non-irradié. Les contributions relatives des différents mécanismes sont reportées.

Le glissement dévié est un mécanisme important dans le fer où la déviation des dislocations vis est facile. A petites déformations, le glissement dévié produit de nombreux super-crans

colinéaires et débris sous forme de boucles qui affectent la mobilité des dislocations des systèmes actifs. Ces super-crans, trop petits pour participer à la déformation plastique, sont la source d'un durcissement non négligeable. Nos simulations montrent que la densité de super-crans et débris issus de la déviation dépend de la direction de sollicitation uniaxiale et de la force des interactions avec les obstacles existants. La déviation est activée lorsque des concentrations de contraintes sont provoquées par ces obstacles. L'effet adoucissant de la déviation est retrouvé à plus forte déformation, lorsque les sections déviées participent à la déformation plastique.

Parmi les défauts d'irradiation, amas de solutés, cavités ou boucles de dislocations, notre travail s'est focalisé sur le durcissement imputé aux cavités, considérées comme les défauts les plus nombreux et les obstacles les plus forts. Les cavités sont introduites dans les simulations comme des particules cisillables avec une contrainte critique de cisaillement déduite à partir des résultats des simulations à l'échelle atomique. Pour cela, une loi de transition d'échelle, basée sur un modèle rendant compte de l'activation thermique, a été utilisée. Le durcissement correspondant est d'environ 70 MPa, mais ne conduit qu'à une augmentation de la contrainte critique d'écoulement de 24 MPa, après une dose de 0,19 dpa, ce qui représente une augmentation de près de 20 %. Par ailleurs, il a été montré que la température est un paramètre important puisque celle-ci favorise le cisaillement des cavités de faible taille. La comparaison avec l'expérience montre que ce durcissement est du même ordre que celui observé sur l'acier de cuve à dose égale. Les cavités constituent vraisemblablement la principale contribution au durcissement induit par irradiation dans les aciers de cuve.

Notre étude de la composition entre mécanismes de durcissement a montré que la connaissance des contraintes associées aux différents mécanismes pris individuellement n'est pas suffisante pour définir la contrainte d'écoulement totale. Les durcissements ne sont pas simplement additifs (*cf.* figure 1.b). Aussi, l'effet d'un mécanisme seul est toujours atténué lorsqu'il est accompagné d'un autre mécanisme. Dans le cas particulier de ce travail, nous avons montré qu'une loi quadratique permet de bien reproduire les résultats des simulations de DD concernant tous les types d'obstacles, différents en force et en densité.

Nos résultats nous ont également permis d'estimer un coefficient d'interaction moyen entre systèmes de glissement de 0,34. Cette valeur est proche des valeurs déterminées expérimentalement dans le fer pur. Nous avons aussi proposé des éléments d'explication à certaines différences de comportement plastique observées entre les matériaux CC et CFC. Les interactions entre systèmes de glissement sont plus fortes dans les matériaux CFC, pour lesquels le gain énergétique associé à la formation des jonctions est généralement plus important.

D'autre part, l'interaction d'un système avec lui-même, déterminant le tau d'érouissage dans le stade I, est plus forte dans le fer par comparaison au cuivre, du fait de l'activation plus prononcée du glissement dévié.

---

## PERSPECTIVES

---

A partir de ces résultats un certain nombre de perspectives se dessinent. Elles sont présentées en partant des plus proches des applications du nucléaire à celles plus fondamentales relatives au comportement plastique du fer.

Assez naturellement, la suite logique de ce travail consiste à intégrer les paramètres physiques identifiés dans cette étude dans des calculs d'agrégats par éléments finis. Des collaborations dans ce but existent déjà au sein du projet PERFECT. Ces approches vont permettre d'aborder, sur une base physique et sans variable ajustée, le comportement mécanique macroscopique. Ces simulations permettront également de faire un lien plus direct avec les essais mécaniques. L'utilisation d'une loi de comportement cristalline devrait permettre une meilleure compréhension des différents mécanismes d'endommagement.

Des perfectionnements pourraient aussi être apportés aux lois simples proposées dans ce travail. En premier lieu, l'évolution des densités de dislocations des systèmes au cours de l'écroutissage plastique pourrait être affinée. Plus précisément, le taux de stockage devrait dépendre du nombre et de la nature des systèmes de glissement activés. On pourra pour cela s'inspirer des travaux en cours plus avancés sur le cuivre. Ensuite, une prise en compte du glissement sur les plans  $\{112\}$  peut s'avérer nécessaire pour étudier la déformation de la ferrite suivant les axes de haute symétrie. Également, le rôle des multi-jonctions qui se forment en glissement multiple, c'est-à-dire la recombinaison de plus de deux dislocations pour former une jonction, devra être étudié. Des modifications assez importantes devront être apportées au code microMegas pour cela.

Un matériau qui présente une microstructure aussi complexe que les aciers de cuve requiert une caractérisation fine et méthodique. Cette direction de recherche apparaît d'autant plus pertinente que des moyens techniques récents permettraient de nouvelles avancées dans la compréhension du comportement plastique des aciers de cuve. A l'échelle de la DD, trois aspects semblent

particulièrement importants. (i) La question probablement la plus cruciale est l'identification des systèmes de glissement actifs au cours de la déformation. Il faudra identifier la différence de comportement sous chargements uniaxial et multiaxial. (ii) Ensuite une caractérisation rigoureuse des carbures intralattes en terme de densité et de distribution de taille serait utile. (iii) Pour finir, une identification de la nature des interfaces entre lattes serait une information importante à la modélisation.

Concernant l'état irradié, nous avons vu que les cavités conduisent à la plus forte contribution à la contrainte d'écoulement. Mais il reste encore à déterminer la contribution des autres défauts d'irradiation. L'étude la plus intéressante sera probablement liée aux boucles de dislocations qui sont la cause de la localisation de la déformation plastique. Les études atomiques réalisées sur les boucles  $\langle 111 \rangle$ , mobiles, ont montré que l'interaction avec les dislocations est complexe. Les mécanismes mis en jeu diffèrent suivant la nature de la boucle, la distance d'interaction et le caractère des dislocations. On sait aujourd'hui encore peu de choses sur les boucles  $\langle 100 \rangle$  qui sont les boucles les plus observées expérimentalement dans les aciers de cuve. Introduire ces objets dans des simulations de manière explicite est difficile en raison de leurs formes et de leur cylindre de mouvement. Ce problème devra donc dans un premier temps être étudié à l'aide de simulations atomiques.

Toujours à l'échelle atomique, les progrès récents concernant la description du cœur des dislocations vis laisse entrevoir de nouvelles perspectives. D'une part, des simulations de Dynamique Moléculaire (DM), par exemple, devraient permettre de comprendre la sélection des plans et l'effet de la température sur les glissements suivant les familles  $\{110\}$  et  $\{112\}$ . D'autre part, une avancée pourrait être faite sur la compréhension du glissement dévié dans le fer. Le critère de déviation utilisé dans la DD devrait être confirmé ou modifié à la lumière de ces possibles résultats. On pourrait ainsi être en mesure de comprendre comment s'opère le choix du plan de déviation parmi tous ceux envisageables.

Les sous-joints ou encore joints de faible désorientation, parfois observés expérimentalement lors des études au MET, peuvent jouer un rôle important en plasticité. Et à condition de disposer d'observations précises, la DD se présente comme la technique la mieux adaptée pour l'étude des propriétés de ces interfaces. Il serait intéressant, entre autre, de comprendre l'influence de ces murs de dislocations sur la contrainte interne et de déterminer des critères de transmission au travers de ces obstacles.

Pour conclure, je soulignerais qu'une étude focalisée sur l'essai de traction de monocristaux de fer serait d'un grand intérêt. Sur le plan expérimental, la précision des moyens d'essais et



d'observation actuels, associée aux nouveaux outils de traitement de données, devraient permettre d'élucider de nombreuses questions en suspens dans la littérature. Une nouvelle base de données expérimentales de référence pourrait ainsi être définie. L'implémentation de la loi cristalline dans des calculs d'éléments finis pour la simulation des essais de traction des monocristaux permettrait de comparer et valider la loi d'écoulement issue de la DD.



---

## ANNEXE A. BASE DE VECTEURS DE DISCRETISATION POUR LA STRUCTURE CUBIQUE CENTREE

---

La Base de Vecteurs de Discrétisation (BVD) est l'ensemble des vecteurs qui sont utilisés dans microMégas pour la description des lignes de dislocations. Pour chaque segment de dislocation, la base associe un vecteur ligne  $\vec{\ell}$ , un vecteur normal au plan de glissement  $\vec{n}$  et le vecteur de déplacement  $\vec{d}$ . Huit directions de ligne sont introduites par système de glissement : 2 orientations vis, 2 coins, ainsi que 2 x 2 orientations mixtes qui correspondent aux directions d'intersection avec les autres plans de glissement. La BVD développée pour les systèmes  $\frac{1}{2} \langle 111 \rangle \{110\}$  de la structure CC est donnée en tableau A.1.

1	( 1 1 0)	[ 1 -1 1]	[ 4 -4 -8]	49	( -1 -1 0)	[ -1 1 1]	[ -4 4 -8]
2	( 1 1 0)	[ 0 0 2]	[ 6 -6 0]	50	( -1 -1 0)	[ 0 0 2]	[ -6 6 0]
3	( 1 1 0)	[ -2 2 4]	[ 2 -2 2]	51	( -1 -1 0)	[ 2 -2 4]	[ -2 2 2]
4	( 1 1 0)	[ -1 1 1]	[ 4 -4 8]	52	( -1 -1 0)	[ 1 -1 1]	[ -4 4 8]
5	( 1 1 0)	[ -1 1 -1]	[ -4 4 8]	53	( -1 -1 0)	[ 1 -1 -1]	[ 4 -4 8]
6	( 1 1 0)	[ 0 0 -2]	[ -6 6 0]	54	( -1 -1 0)	[ 0 0 -2]	[ 6 -6 0]
7	( 1 1 0)	[ 2 -2 -4]	[ -2 2 -2]	55	( -1 -1 0)	[ -2 2 -4]	[ 2 -2 -2]
8	( 1 1 0)	[ 1 -1 -1]	[ -4 4 -8]	56	( -1 -1 0)	[ -1 1 -1]	[ 4 -4 -8]
9	( -1 0 1)	[ 1 -1 1]	[ 4 8 4]	57	( 1 0 1)	[ -1 1 1]	[ -4 -8 4]
10	( -1 0 1)	[ 0 -2 0]	[ 6 0 6]	58	( 1 0 1)	[ 0 2 0]	[ -6 0 6]
11	( -1 0 1)	[ -2 -4 -2]	[ 2 -2 2]	59	( 1 0 1)	[ 2 4 -2]	[ -2 2 2]
12	( -1 0 1)	[ -1 -1 -1]	[ 4 -8 4]	60	( 1 0 1)	[ 1 1 -1]	[ -4 8 4]
13	( -1 0 1)	[ -1 1 -1]	[ -4 -8 -4]	61	( 1 0 1)	[ 1 -1 -1]	[ 4 8 -4]
14	( -1 0 1)	[ 0 2 0]	[ -6 0 -6]	62	( 1 0 1)	[ 0 -2 0]	[ 6 0 -6]
15	( -1 0 1)	[ 2 4 2]	[ -2 2 -2]	63	( 1 0 1)	[ -2 -4 2]	[ 2 -2 -2]
16	( -1 0 1)	[ 1 1 1]	[ -4 8 -4]	64	( 1 0 1)	[ -1 -1 1]	[ 4 -8 -4]
17	( 0 -1 -1)	[ 1 -1 1]	[ -8 -4 4]	65	( 0 1 -1)	[ -1 1 1]	[ 8 4 4]
18	( 0 -1 -1)	[ 2 0 0]	[ 0 -6 6]	66	( 0 1 -1)	[ -2 0 0]	[ 0 6 6]
19	( 0 -1 -1)	[ 4 2 -2]	[ 2 -2 2]	67	( 0 1 -1)	[ -4 -2 -2]	[ -2 2 2]
20	( 0 -1 -1)	[ 1 1 -1]	[ 8 -4 4]	68	( 0 1 -1)	[ -1 -1 -1]	[ -8 4 4]
21	( 0 -1 -1)	[ -1 1 -1]	[ 8 4 -4]	69	( 0 1 -1)	[ 1 -1 -1]	[ -8 -4 -4]
22	( 0 -1 -1)	[ -2 0 0]	[ 0 6 -6]	70	( 0 1 -1)	[ 2 0 0]	[ 0 -6 -6]
23	( 0 -1 -1)	[ -4 -2 2]	[ -2 2 -2]	71	( 0 1 -1)	[ 4 2 2]	[ 2 -2 -2]
24	( 0 -1 -1)	[ -1 -1 1]	[ -8 4 -4]	72	( 0 1 -1)	[ 1 1 1]	[ 8 -4 -4]
25	( 0 -1 1)	[ 1 1 1]	[ -8 4 4]	73	( 1 -1 0)	[ 1 1 -1]	[ 4 4 8]
26	( 0 -1 1)	[ 2 0 0]	[ 0 6 6]	74	( 1 -1 0)	[ 0 0 -2]	[ 6 6 0]
27	( 0 -1 1)	[ 4 -2 -2]	[ 2 2 2]	75	( 1 -1 0)	[ -2 -2 -4]	[ 2 2 -2]
28	( 0 -1 1)	[ 1 -1 -1]	[ 8 4 4]	76	( 1 -1 0)	[ -1 -1 -1]	[ 4 4 -8]
29	( 0 -1 1)	[ -1 -1 -1]	[ 8 -4 -4]	77	( 1 -1 0)	[ -1 -1 1]	[ -4 -4 -8]
30	( 0 -1 1)	[ -2 0 0]	[ 0 -6 -6]	78	( 1 -1 0)	[ 0 0 2]	[ -6 -6 0]
31	( 0 -1 1)	[ -4 2 2]	[ -2 -2 -2]	79	( 1 -1 0)	[ 2 2 4]	[ -2 -2 2]
32	( 0 -1 1)	[ -1 1 1]	[ -8 -4 -4]	80	( 1 -1 0)	[ 1 1 1]	[ -4 -4 8]
33	( 1 0 -1)	[ 1 1 1]	[ 4 -8 4]	81	( -1 0 -1)	[ 1 1 -1]	[ 4 -8 -4]
34	( 1 0 -1)	[ 0 2 0]	[ 6 0 6]	82	( -1 0 -1)	[ 0 2 0]	[ 6 0 -6]
35	( 1 0 -1)	[ -2 4 -2]	[ 2 2 2]	83	( -1 0 -1)	[ -2 4 2]	[ 2 2 -2]
36	( 1 0 -1)	[ -1 1 -1]	[ 4 8 4]	84	( -1 0 -1)	[ -1 1 1]	[ 4 8 -4]
37	( 1 0 -1)	[ -1 -1 -1]	[ -4 8 -4]	85	( -1 0 -1)	[ -1 -1 1]	[ -4 8 4]
38	( 1 0 -1)	[ 0 -2 0]	[ -6 0 -6]	86	( -1 0 -1)	[ 0 -2 0]	[ -6 0 6]
39	( 1 0 -1)	[ 2 -4 2]	[ -2 -2 -2]	87	( -1 0 -1)	[ 2 -4 -2]	[ -2 -2 2]
40	( 1 0 -1)	[ 1 -1 1]	[ -4 -8 -4]	88	( -1 0 -1)	[ 1 -1 -1]	[ -4 -8 4]
41	( -1 1 0)	[ 1 1 1]	[ 4 4 -8]	89	( 0 1 1)	[ 1 1 -1]	[ -8 4 -4]
42	( -1 1 0)	[ 0 0 2]	[ 6 6 0]	90	( 0 1 1)	[ 2 0 0]	[ 0 6 -6]
43	( -1 1 0)	[ -2 -2 4]	[ 2 2 2]	91	( 0 1 1)	[ 4 -2 2]	[ 2 2 -2]
44	( -1 1 0)	[ -1 -1 1]	[ 4 4 8]	92	( 0 1 1)	[ 1 -1 1]	[ 8 4 -4]
45	( -1 1 0)	[ -1 -1 -1]	[ -4 -4 8]	93	( 0 1 1)	[ -1 -1 1]	[ 8 -4 4]
46	( -1 1 0)	[ 0 0 -2]	[ -6 -6 0]	94	( 0 1 1)	[ -2 0 0]	[ 0 -6 6]
47	( -1 1 0)	[ 2 2 -4]	[ -2 -2 -2]	95	( 0 1 1)	[ -4 2 -2]	[ -2 -2 2]
48	( -1 1 0)	[ 1 1 -1]	[ -4 -4 -8]	96	( 0 1 1)	[ -1 1 -1]	[ -8 -4 4]

---

## ANNEXE B. PROCEDURE DE DETECTION DES OBSTACLES

---

La connaissance de la contrainte effective sur un segment de dislocation, associé à la loi de mobilité permet de définir le déplacement prédit. Mais ce dernier ne rend compte que partiellement de la présence de dislocations environnantes. Il est donc nécessaire de détecter s'il existe une intersection lors du déplacement du segment considéré et un éventuel segment de dislocation obstacle. Ceci fait l'objet d'une procédure spécifique que nous avons réécrite.

Le fil conducteur de cette procédure est la définition de l'aire balayée par le segment à déplacer, elle est définie par les positions avant et après déplacement ainsi que des rails : les voisins dans la majeure partie des cas (cf. figure B.1.a). La procédure est découpée logiquement en deux étapes distinctes. Dans un premier temps, nous cherchons à détecter les obstacles potentiels qui coupent l'aire que balaye le segment à déplacer. Ensuite l'obstacle définitif est sélectionné parmi ceux qui ont été détectés, et la réaction qui peut se produire est définie.

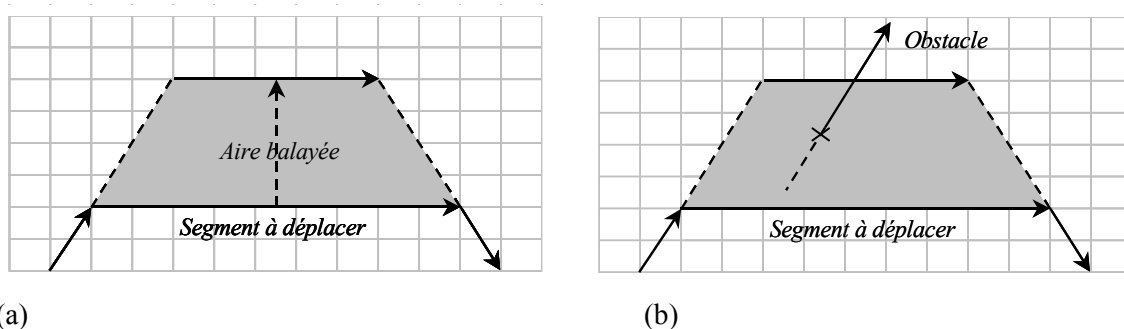


Figure B.1. (a) Définition de l'aire balayée prédite pour un segment, comprise entre les positions avant et après déplacement et les rails. (b) Configuration dans laquelle l'obstacle pose un problème de sous réseau.

L'étape de détection peut être très coûteuse en temps de calcul car elle varie en  $N^2$  avec  $N$  le nombre de segments de la simulation. Différentes solutions ont été reprises de la précédente

procédure pour éliminer le plus rapidement possible les segments qui ne peuvent être obstacles. D'une part les segments voisins du segment à déplacer par exemple ou de norme nulle ne sont pas considérés. D'autre part la recherche d'obstacles est restreinte aux segments qui appartiennent à la même boîte (l'espace étant régionaliser pour des raisons d'optimisation numérique) que le segment à déplacer, tous les autres étant, bien entendu, trop distants.

Après ce premier tri, le point d'intersection entre les segments restants et l'aire balayée est déterminé. La principale nouveauté est liée au traitement de cas spécifiques comme le croisement d'un segment sur un rail. A la fin de cette étape, les segments considérés comme obstacles non seulement coupent l'aire balayée mais sont ceux les plus proches du segment à déplacer (dans le cas d'obstacles multiples). La discrétisation de l'espace induit un certain nombre de difficultés dans la gestion des intersections, et notamment l'apparition de sous réseaux. Autrement dit, l'intersection entre un segment et l'aire balayée peut ne pas correspondre au réseau de simulation comme cela est illustré en figure B.1.b. Dans ce genre de situation, le segment est déplacé à la dernière position devant son obstacle qui reste compatible avec la discrétisation. La réaction n'est pas réalisée. Elle pourra se former aux itérations suivantes dans la mesure où une configuration est obtenue sans problème de sous réseaux.

Dans la phase de sélection de l'obstacle final, un certain nombre de cas particuliers apparaissent. D'une part, il est nécessaire de repérer les problèmes à trois corps au sens large. Il s'agit de l'intersection du segment à déplacer avec deux autres segments en des points différents, qui peuvent appartenir ou non à une même dislocation. Certaines de ces situations sont données en exemple en figure B.2. Dans ce genre de configurations, le segment à déplacer est simplement discrétisé, reportant ainsi aux itérations suivantes la décision de réaction ou non.

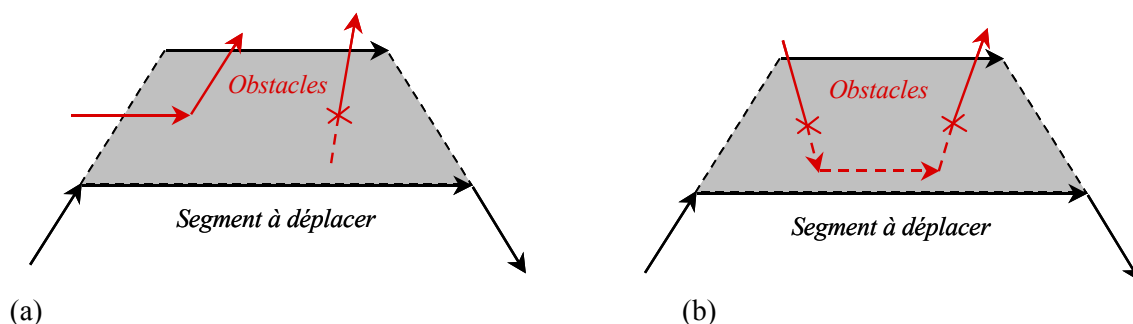


Figure B.2. Exemples de configurations qui conduisent à l'intersection de trois corps. (a) les deux obstacles appartiennent à des dislocations différentes, (b) les segments obstacles sont interconnectés.

Si le déplacement jusqu'à l'obstacle ne pose pas de problème, c'est à dire sans problème de sous réseau ni de problème à trois corps, il faut s'assurer de la faisabilité de la réaction à l'aide du critère de Franck, qui vérifie que l'énergie élastique de la recombinaison des lignes est

inférieure à la somme des énergies des deux dislocations individuelle.

D'autre part et d'une manière générale la priorité est donnée aux annihilations qui réduit plus significativement l'énergie des dislocations que les jonctions. Ainsi une jonction peut être détruite si une annihilation est possible avec l'un des binômes de la jonction.

Enfin, il faut mentionner que cette procédure détecte les configurations associées aux multi-jonctions, c'est-à-dire la réaction d'une jonction déjà existante avec une troisième dislocation. Toutefois, le traitement n'est pas complet, la dislocation qui coupe une jonction est simplement arrêtée devant la recombinaison et laisse libre de se zipper sur la jonction. La jonction initiale étant sessile, le tripôle final est lui-même immobile.

---

## ANNEXE C. PARAMETRES D'ENTREE DES SIMULATIONS

---

Les simulations de DD font appel à un grand nombre de paramètres qui sont, soit liés à la physique, soit nécessaires au fonctionnement de la simulation. Ces variables sont regroupées, par commodité, dans trois différents fichiers d'entrée :

- Le fichier « matériau » regroupe les propriétés élastiques du matériau, sa structure cristallographique et les caractéristiques des dislocations (vecteur de Burgers, plans de glissement et loi de mobilité).
- Ensuite, le fichier « segments » contient la microstructure initiale de dislocations. En pratique, il s'agit des dimensions du volume de simulation, des coordonnées des points d'extrémité, du vecteur ligne et de la longueur des segments qui composent les dislocations.
- Le fichier « contrôle » décrit le mode de chargement désiré ainsi que les paramètres liés à la discrétisation de l'espace et du temps.

Les principaux paramètres associés aux deux premiers fichiers d'entrée ont déjà été présentés. C'est pourquoi, dans ce qui suit, nous nous intéressons seulement au fichier « contrôle ». Trois exemples de ce type de fichier sont donnés en illustration en figure C.1. Ils ont été utilisés pour des simulations bien distinctes au cours de ce travail, à savoir des simulations de l'écroutissage latent (*cf.* Chapitre III), du glissement double selon l'axe [113] (*cf.* Chapitre III), et des simulations portant sur l'interaction des dislocations avec les cavités (*cf.* Chapitre VI). Les définitions de chaque variable sont données dans la figure C.1. On mentionnera en particulier l'*échelle* qui est associée à la discrétisation de l'espace et introduite comme le ratio du vecteur de Burgers simulé sur celui du matériau. Plus l'*échelle* est basse, plus il est possible de réduire la longueur de discrétisation et ainsi d'affiner la discrétisation des dislocations. Ensuite, on retrouve les différents paramètres associés au mode de déformation, comme le taux de déformation, l'axe de déformation, la température et la contrainte initiale. Un des paramètres est dédié au choix de la formule de tension de ligne utilisée. Il est également possible de réaliser des simulations en commençant par un certain nombre d'itérations de



relaxation. Enfin, différentes variables sont affectées au contrôle du mouvement des dislocations, comme par exemple la limitation du déplacement des segments quand ceux-ci sont plus mobiles que le reste de la microstructure.

0	mode_deformation	0=strain rate.; 1=make carto; 2=run carto; 3=stress rate.; 4=creep; 5=fatigue; 6=metalofute; 7=metalofute2
1.1	ECHELLE	Simulation reference scale, i.e. size of the elementary BD vectors. (unit = Burgers vectors)
T	shear	Key of signification of following value: T(for shear stress), F(stress)
30	Sigma0	Initial stress (MPa)
1.D-11	DELTA0	Elementary time step (s)
2000	EpsilonPoint	Imposed strain rate (s-1) (mode_deformation=0,5,6,7)
0.3	RAID	Apparente Young modulus (mode_deformation=0,5,6,7)
1	LINTEN	Line tension key: 0 -> Cste energy approximation; 1 -> Isotropic solution; 2 -> Anisotropic solution
F	GLDEV	Cross slip key:GLDEV=True means cross-slip active
11 1 5	Tensile_axis	Tensile or compression uniaxial test direction (miller indices)
300.	TEMPERATURE	Temperature (Kelvin)
50	Facteur_Depmax	Maximum displacement tolerate for a dislocation segment (unit=BD vectors)
50	NstatControl	Number of steps accounted for in the simulation control feedback procedure ((mode_deformation=0,5,6,7)
0	relax_TL	Number of steps for the intial relaxation with only a line tension
0	relax_INT	Number of steps for the intial relaxation with no applied loading and no contact reactions
3000	relax_reac	Number of steps for the intial relaxation with no applied loading
1D9	NSTEP	Number of steps for the simulation
0.1	Ldis_act	Reference mean length to force segments discretization (micron)
0.15	Ldis_nact	Reference mean length to force segments discretization on inactive slip systems (micron)
10	Period	Step periodicity at which the force on waiting (quasi-immobile) segments is recalculate
10	KRC	Step periodicity at which the long-range contribution to the internal stress is recalculated (if Greengard method)
0.3	L_Boite	Linear mean size of the domaines used in the Greengard method (micron), negative value means dynamically defined
5.0	AB_LENGTH_SEUIL	Maximum length of segments neglected in the long range contribution (if Greengard method)
5	DCFJ	Distance at which stress is calculated on the segments connected to a junction (unit: vector BD)
200	TauINT_LIMITE	Critical stress at which the segments are considered as singular (MPa)
1000	KISAUVE	Writing periodicity of the simulation segment configuration and information needed to restart a computation
500	KSTATS	Writing periodicity if simulation results
300	KKIM	Writing periodicity of the trajectory film information
50	KPREDRAW	Periodicity of the graphical interaface refresh
2	shift_rotation	key for the translation and rotation of the simulation box boundary conditions (see the file shift_rotation)

(a)

0	mode_deformation	0=strain rate.; 1=make carto; 2=run carto; 3=stress rate.; 4=creep; 5=fatigue; 6=metalofute; 7=metalofute2
1.1	EHELLE	Simulation reference scale, i.e. size of the elementary BD vectors. (unit = Burgers vectors)
T	shear	Key of signification of following value: T(for shear stress), F(stress)
30	Sigma0	Initial stress (MPa)
5.D-12	DELTAT0	Elementary time step (s)
5000	EpsilonPoint	Imposed strain rate (s-1) (mode_deformation=0,5,6,7)
0.8	RAID	Apparente Young modulus (mode_deformation=0,5,6,7)
1	LINTEN	Line tension key: 0 -> Cste energy approximation; 1 -> Isotropic solution; 2 -> Anisotropic solution
T	GLDEV	Cross slip key:GLDEV=True means cross-slip active
-1 1 3	Tensile_axis	Tensile or compression uniaxial test direction (miller indices)
300.	TEMPERATURE	Temperature (Kelvin)
50	Facteur_Depmax	Maximum displacement tolerate for a dislocation segment (unit=BD vectors)
50	NstatControl	Number of steps accounted for in the simulation control feedback procedure ((mode_deformation=0,5,6,7)
0	relax_TL	Number of steps for the initial relaxation with only a line tension
0	relax_INT	Number of steps for the initial relaxation with no applied loading and no contact reactions
3000	relax_reac	Number of steps for the initial relaxation with no applied loading
1D9	NSTEP	Number of steps for the simulation
0.05	Ldis_act	Reference mean length to force segments discretization (micron)
0.15	Ldis_nact	Reference mean length to force segments discretization on inactive slip systems (micron)
10	Period	Step periodicity at which the force on waiting (quasi-immobile) segments is recalculate
10	KRC	Step periodicity at which the long-range contribution to the internal stress is recalculated (if Greengard method)
-0.5	L_Boite	Linear mean size of the domaines used in the Greengard method (micron), negative value means dynamically defined
5.0	AB_LENGTH_SEUIL	Maximum length of segments neglected in the long range contribution (if Greengard method)
5	DCFJ	Distance at which stress is calculated on the segments connected to a junction (unit: vector BD)
200	TauINT_LIMITE	Critical stress at which the segments are considered as singular (MPa)
1000	KISAUVE	Writing periodicity of the simulation segment configuration and information needed to restart a computation
500	KSTATS	Writing periodicity if simulation results
300	KKIM	Writing periodicity of the trajectory film information
50	KPREDRAW	Periodicity of the graphical interface refresh
2	shift_rotation	key for the translation and rotation of the simulation box boundary conditions (see the file shift_rotation)

(b)

0	mode_deformation	0=strain rate.; 1=make carto; 2=run carto; 3=stress rate.; 4=creep; 5=fatigue; 6=metalofute; 7=metalofute2
0.25	ECHELLE	Simulation reference scale, i.e. size of the elementary BD vectors. (unit = Burgers vectors)
T	shear	Key of signification of following value: T(for shear stress), F(stress)
50	Sigma0	Initial stress (MPa)
2.5D-13	DELTAT0	Elementary time step (s)
70000	EpsilonPoint	Imposed strain rate (s-1) (mode_deformation=0,5,6,7)
1	RAID	Apparente Young modulus (mode_deformation=0,5,6,7)
4	LINTEN	Line tension key: 0 -> Friedel approx; 1 -> Isotropic; 2 -> Isotropic Foreman; 3 -> Anisotropic solution 4 -> Mohles
F	GLDEV	Cross slip key:GLDEV=True means cross-slip active
2 0 0	Tensile_axis	Tensile or compression uniaxial test direction (miller indices)
300.	TEMPERATURE	Temperature (Kelvin)
50	Facteur_Depmax	Maximum displacement tolerate for a dislocation segment (unit=BD vectors)
50	NstatControl	Number of steps accounted for in the simulation control feedback procedure ((mode_deformation=0,5,6,7)
0	relax_TL	Number of steps for the intial relaxation with only a line tension
0	relax_INT	Number of steps for the intial relaxation with no applied loading and no contact reactions
3000	relax_reac	Number of steps for the intial relaxation with no applied loading
1D9	NSTEP	Number of steps for the simulation
0.01	Ldis_act	Reference mean length to force segments discretization (micron)
0.1	Ldis_nact	Reference mean length to force segments discretization on inactive slip systems (micron)
10	Period	Step periodicity at which the force on waiting (quasi-immobile) segments is recalculate
10	KRC	Step periodicity at which the long-range contribution to the internal stress is recalculated (if Greengard method)
0.065	L_Boite	Linear mean size of the domaines used in the Greengard method (micron), negative value means dynamically defined
5.0	AB_LENGTH_SEUIL	Maximum length of segments neglected in the long range contribution (if Greengard method)
5	DCFJ	Distance at which stress is calculated on the segments connected to a junction (unit: vector BD)
1000	TauINT_LIMITE	Critical stress at which the segments are considered as singular (MPa)
2000	KISAUVE	Writing periodicity of the simulation segment configuration and information needed to restart a computation
500	KSTATS	Writing periodicity if simulation results
500	KKIM	Writing periodicity of the trajectory film information
50	KPREDRAW	Periodicity of the graphical interaface refresh
2	shift_rotation	key for the translation and rotation of the simulation box boundary conditions (see the file shift_rotation)

(c)

Figure C.1. Différents fichiers d'entrée « contrôle » utilisés au cours de ce travail. Ils regroupent les variables affectées au mode de chargement et à la discrétisation de l'espace et du temps. Ces trois exemples correspondent à des simulations typiques de l'écrouissage latent (a), du glissement double (b) et de l'interaction avec une distribution de cavités.

---

## ANNEXE D. MATRICE D'INTERACTION ENTRE LES SYSTEMES {110}

---

La matrice d'interaction définit la nature de la réaction entre un système de glissement  $i$  et un second  $j$ . Pour chaque interaction  $i-j$  nous avons réalisé l'analyse des propriétés de la réaction formée (*cf.* III.1.1). C'est-à-dire que nous avons déterminé pour chaque couple  $i-j$ , le vecteur de Burgers, le vecteur ligne de la réaction. Quand cela est nécessaire nous avons défini l'angle entre les vecteurs de Burgers des systèmes mis en jeux et la direction de la recombinaison. La matrice d'interaction est bien évidemment symétrique. Elle est donnée dans le tableau C.1 pour les différents systèmes {110} dont l'indexation est rappelée dans le tableau C.2. Pour simplifier, le nom des différentes interactions est remplacé par une abréviation. On retrouve les six interactions introduites dans la partie III.1.1 : les interactions sans contact dipolaire (dipol.) et coplanaire (coplan.), l'annihilation colinéaire (coli.) et les jonctions mixte symétrique (sym.), mixte asymétrique (asym.) et la jonction coin (coin).

Il faut mentionner que Madec et Kubin<sup>3</sup> proposent également une matrice d'interaction portant sur les systèmes {110} et {112}.

---

<sup>3</sup> R. Madec et L. Kubin, éditeurs P. Vincenzini et A. Lami, 3rd international Conference Computational Modeling and Simulation of Materials part A, 671, Techna Group Srl, (2005).

Tableau C.1. Matrice d'interaction entre les douze systèmes  $\{110\}$ . Les systèmes correspondant aux indices sont définis dans le tableau C.2.

Systèmes	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
1	dipol.	coli.	coli.	sym.	asym.	coin	copla.	asym.	asym.	coin	sym.	asym.
2		dipol.	coli.	asym.	copla.	asym.	asym.	coin	sym.	sym.	coin	asym.
3			dipol.	coin	asym.	sym.	asym.	sym.	coin	asym.	asym.	copla.
4				dipol.	coli.	coli.	asym.	asym.	copla.	asym.	sym.	coin
5					dipol.	coli.	sym.	coin	asym.	asym.	coin	sym.
6						dipol.	coin	sym.	asym.	copla.	asym.	asym.
7							dipol.	coli.	coli.	coin	asym.	sym.
8								dipol.	coli.	asym.	copla.	asym.
9									dipol.	sym.	asym.	coin
10										dipol.	coli.	coli.
11											dipol.	coli.
12												dipol.

Tableau C.2. Rappel de la numérotation des douze systèmes de plans  $\{110\}$  dans la structure CC (identique au tableau III.1).

Indice	Plan	$\vec{b}$	Indice	Plan	$\vec{b}$
1	(110)	$[\bar{1}\bar{1}1]$	7	$(\bar{1}\bar{1}0)$	$[\bar{1}\bar{1}1]$
2	$(\bar{1}01)$	$[\bar{1}\bar{1}1]$	8	(101)	$[\bar{1}\bar{1}1]$
3	$(0\bar{1}\bar{1})$	$[\bar{1}\bar{1}1]$	9	$(01\bar{1})$	$[\bar{1}\bar{1}1]$
4	$(0\bar{1}1)$	$[111]$	10	$(1\bar{1}0)$	$[11\bar{1}]$
5	$(10\bar{1})$	$[111]$	11	$(\bar{1}0\bar{1})$	$[11\bar{1}]$
6	$(\bar{1}10)$	$[111]$	12	(011)	$[11\bar{1}]$





## Résumé

Afin de contribuer à une meilleure compréhension et prévision du comportement sous irradiation des aciers des cuves des réacteurs nucléaires à eau sous pression, un programme européen (FP7-IP PERFECT) a été mis en oeuvre associant caractérisations expérimentales et modélisations multi-échelles. Dans ce cadre, la modélisation de la déformation plastique des lattes ferritiques, principal constituant de ces aciers, a été entreprise.

A l'état non-irradié, la contrainte d'écoulement -dans les lattes dépend de plusieurs éléments microstructuraux : densité de dislocations, distribution des carbures et friction d'alliage. La technique de simulation par Dynamique des Dislocations (DD) apparaît comme le seul outil quantitatif permettant de prendre en compte explicitement la microstructure du matériau et d'évaluer l'effet de chaque composante. Après une étude bibliographique approfondie, nous avons établi la contrainte associée à la friction d'alliage dans les lattes ferritiques. La modélisation d'un essai de traction par DD montre que le durcissement de la forêt est le mécanisme dominant l'écoulement plastique. Des simulations de l'écrouissage latent permettent aussi d'évaluer quantitativement les interactions entre systèmes de glissement. De plus, les simulations incluant la présence de carbures intragranulaires montrent que ces derniers influencent surtout la densité de dislocations stockées en cours de déformation.

Finalement, il a été vérifié qu'une loi de superposition quadratique reproduisait précisément l'influence des différents mécanismes de durcissement. L'effet du glissement dévié a également été étudié. Au vu des observations expérimentales, ce mécanisme est supposé

facile dans la ferrite et fonction uniquement de l'état de contrainte locale. Les simulations de DD révèlent un rôle complexe de ce mécanisme. D'une part, la présence de nombreux événements de déviation conduit à l'ancrage systématique des dislocations mobiles, ce qui constitue un facteur d'écrouissage. D'autre part, aux déformations plus fortes, la déviation de segments vis permet de relaxer certaines concentrations de contraintes dans les microstructures, ce qui représente un mécanisme d'adoucissement.

A l'état irradié, par souci de simplification, les seuls éléments durcissants supplémentaires pris en compte ont été les cavités. Leur densité et leur distribution en taille sont issues de simulations de cinétique chimique. D'après des résultats de dynamique moléculaire, une loi de transition d'échelle permet de déterminer, les énergies d'activation pour le cisaillement des cavités. Au final, une méthodologie simple a été implantée dans la simulation de DD. Celle-ci permet de rendre compte de l'effet de la température et de la vitesse de déformation sur le cisaillement. Les dernières simulations montrent que la prise en compte d'une microstructure de cavités réaliste conduit à un durcissement relatif comparable à l'expérience. Les cavités sont alors probablement la source principale de durcissement induit lors de l'irradiation de ces aciers.

**Mots clef :** Aciers de cuve, comportement plastique, régime athermique, loi cristalline, matériau cubique centré, simulations, dynamique de dislocations, interactions entre dislocations, mécanisme de la forêt, carbures, mécanisme d'Orowan, composition de mécanismes, loi de mélange, glissement dévié, irradiation neutronique, cavités.

## Abstract

To contribute to a better understanding and prediction of the behaviour of vessel steel of pressure water reactor under irradiation, a European project (FP7-IP PERFECT) which associates experimental characterization and multi-scale modeling has been operated. In this framework, the modeling of the plastic deformation of ferritic lathes, main constituent of these steels, has been done.

At the non-irradiated state, the flow stress of the lathes depends on different microstructural elements: dislocation density, carbides distribution and alloy friction. The technique of Dislocation Dynamics (DD) appears to be the single quantitative tool allowing to explicitly account for the material microstructure and to estimate the effect of each element. After a detailed literature review, we have defined the stress associated to alloy friction inside ferritic lathes.

The DD simulation of a tensile test shows that forest strengthening is the dominant mechanism of the flow stress. Latent hardening simulations allow a quantitative estimation of the interaction strength between slip systems. Besides, simulations including carbides inside lathes point out that these carbides affect mainly the density of dislocations stored during deformation.

Finally, we have checked that a quadratic mixture law reproduces well the effect of the different strengthening mechanisms. The effect of cross slip has also been studied. Considering the experimental observations, cross slip is supposed to be easy in ferrite and depends only on the local

stress state. DD simulations reveal the complex role played by this mechanism. On one side, the appearance of numerous cross slip segments leads to the pinning of primary dislocations, inducing an hardening. On the other side, at larger deformation, deviation of screw dislocations relaxes the microstructure stress concentrations, which is a recovering mechanism.

At the irradiated state, for the sake of simplicity, voids are the only supplementary strengthening considered. Voids density and size are given by rate theory simulations. Starting from molecular dynamics results, a scale transition law enables the determination of activation energies needed to shear voids. Finally, a simple methodology is implemented in DD simulations. It takes into account the effect of the temperature and the deformation rate on the shear. The most recent simulations, starting from a realistic microstructure of voids, leads to a relative strengthening comparable to the ones observed during experiments. Thus, voids are probably the main source of strengthening induced by the irradiation in these steels.

**Key - words :** Vessel steels, plastic behaviour, athermal regime, single-crystal law, cubic centered material, simulations, dislocation dynamics, dislocation interactions, forest mechanism, carbides, Orowan mechanism, strengthening composition, mixture law, neutron irradiation, voids.