



Optimisation d'un code de dynamique des dislocations pour l'étude de la plasticité des aciers ferritiques

Daniel Garcia Rodriguez Garcia Rodriguez

► To cite this version:

Daniel Garcia Rodriguez Garcia Rodriguez. Optimisation d'un code de dynamique des dislocations pour l'étude de la plasticité des aciers ferritiques. Autre. Université de Grenoble, 2011. Français. NNT : 2011GRENI075 . tel-00767178

HAL Id: tel-00767178

<https://theses.hal.science/tel-00767178>

Submitted on 19 Dec 2012

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

THÈSE

Pour obtenir le grade de

DOCTEUR DE L'UNIVERSITÉ DE GRENOBLE

Spécialité : **Matériaux, Mécanique, Génie civil, Electrochimie**

Arrêté ministériel : 7 août 2006

Présentée par

« **Daniel GARCIA-RODRIGUEZ** »

Thèse dirigée par « **Marc FIVEL** » et
codirigée par « **Laurent DUPUY** »

préparée au sein du **Service de Recherche en Métallurgie Appliquée (CEA-Saclay/SRMA)** et au laboratoire **Science et Ingénierie des Matériaux et des Procédés (SIMaP-GPM2)** dans l'**École Doctorale Ingénierie – Matériaux, Mécanique, Environnement, Energétique**

Optimisation d'un code de dynamique de dislocations pour l'étude de la plasticité des aciers ferritiques

Thèse soutenue publiquement le « **15 février 2011** »,
devant le jury composé de :

M. André PINEAU

Président

M. Daniel CAILLARD

Rapporteur

M. Ghiath MONNET

Rapporteur

M. Marc FIVEL

Membre

M. Laurent DUPUY

Membre

M. Christian ROBERTSON

Membre



Remerciements

Je tiens tout d'abord à remercier M. André PINEAU, non seulement pour avoir accepté de présider un jury sur une thématique écartée de son cœur de connaissance, mais surtout pour avoir su me montrer l'importance de l'industrie et l'enseignement pour la société, et de la recherche pour l'industrie et l'enseignement. Je ne pense pas me tromper si j'affirme que je n'aurais sûrement pas réalisé de thèse si nos vies ne s'étaient pas croisées aux Mines de Paris. Je sais que je n'y serais pas arrivé où j'en suis si ce n'est grâce à lui.

Je remercie M. Daniel CAILLARD et M. Ghiath MONNET, pour avoir accepté de rapporter sur un manuscrit de thèse aussi dense que controversé, tout en gardant un regard aussi ouvert que critique sur son contenu. Je ne peux que partager leurs doutes et j'espère que des travaux futurs nous serviront à élucider à propos de ce sujet qui nous est cher.

Merci au CEA, pour avoir mis en place le programme de formation par la recherche qui a servi à financer ces travaux, pour donner aux étudiants accès à des moyens scientifiques humains et matériels de premier niveau sans importer leurs ressources économiques.

J'aimerais aussi remercier à M. Laurent DUPUY et M. Marc FIVEL, pour m'avoir offert l'opportunité de réaliser ces travaux et de bénéficier de leurs outils et expérience alors que je n'y connaissais pas grand-chose sur le monde de la dislocation. Merci aussi à M. Christian ROBERTSON, autant pour avoir su réagir dans les moments difficiles, que pour son sens pratique et son positivisme déjà légendaires entre les thésards du LC2M. Difficile pour moi de douter que l'enthousiasme et franchise de M. Robertson ne puissent pas réussir à mener n'importe quel projet vers l'avant. Je remercie également M. Bernard MARINI, pour avoir pris le temps de suivre mes travaux, et pour les nombreuses discussions qui ont réussi à catalyser ma pensée au cours de ces trois années. C'est en grande partie en réfléchissant avec M. Marini que j'ai trouvé autant de questions pertinentes que d'ébauches de réponse que présentées dans ce manuscrit. Merci à Michel TRUONG pour son soutien informatique continu et amitié sincère, ainsi qu'à Natalie PALAYAN, pour sa patience avec ma maladresse administrative.

Je tiens de même à exprimer ma reconnaissance envers tous ceux avec qui j'ai « vécu » au LC2M pendant ces trois ans. Permanents, intérimaires, chercheurs, techniciens, thésards, stagiaires... Merci en particulier à *Ludo*, Antonin, *Jeremite*, *Mlle Parodovsky*, *Martinsite*, *Pierrito*, *Nakumara Yogi*, *Masa-chan*, *Erwanou*, *Rata-chan*, Jia, et *Matesito*, pour avoir allégé la charge de la thèse avec votre bonne humeur et discussions toutes thématiques confondues. Merci pour ces mêmes raisons aux 4 ou 5 promos de MAIOT que j'ai eu le plaisir de rencontrer : *Clems Tsunami*, *Piero d'Aosta*, *Benoms*, Sophie, Julien, Pauline, et tant d'autres que je ne saurais citer ici.

Merci à Sir Rudolph PEIERLS, pour m'avoir encouragé sans le savoir en se prononçant dans ces termes à propos des dislocations: "*I did not have in 1939, nor I have today, any close knowledge or any deep understanding of the problems of dislocations*" [Dislocation dynamics, Batelle Colloquia 1967].

Merci M. TAVASSOLI, pour votre soutien dans l'ombre pendant ces trois ans, pour avoir eu le courage de montrer mes travaux de vous-même et contribué à leur visibilité à l'extérieur du CEA. Merci pour votre intérêt dans les jeunes chercheurs, votre vision impartiale du monde et tant de discussions que de « bagarres » au quotidien. Merci surtout d'avoir su me donner les bons conseils lorsque j'en avais besoin, merci Farhad.

Merci finalement à ma famille et mes amis, et surtout à ma mère, ma femme Atsuko, et Rubén, car sans votre soutien infatigable je n'aurais pas pu mener à bout cette grande odyssée qui fût ma thèse.

À l'Humanité (si jamais ceci peut lui servir à quelque chose ...)

Résumé / Abstract

OPTIMISATION D'UN CODE DE DYNAMIQUE DES DISLOCATIONS POUR L'ETUDE DE LA PLASTICITE DES ACIERS FERRITIQUES

Ces travaux de thèse s'inscrivent au sein d'une démarche multi-échelles visant à améliorer la compréhension de la fragilisation par l'irradiation de l'acier de cuve. Dans ce cadre, nous nous intéressons à la description de la mobilité des dislocations dans la ferrite, l'une des entrées clé pour les codes de dynamique de dislocations (DD). Nous présentons ainsi une revue bibliographique exhaustive des différentes théories et expressions de la mobilité, à partir de laquelle nous proposons une nouvelle expression pour les dislocations vis. Cette loi, utilisable pour la première fois dans le régime de transition ductile-fragile, permet de reproduire les principales observations expérimentales disponibles à ce niveau. Finalement, nous montrons les améliorations apportées au code de DD Tridis BCC 2.0, qui intègrent la nouvelle loi de mobilité avec une nouvelle gestion des segments de dislocation permettant de stabiliser et accélérer des simulations complexes avec prise en compte du glissement dévié.

MOTS CLÉS : Dislocation, vis, mobilité, double décrochement, transition, athermique, thermique, plasticité, acier, ferrite, fer CC, cubique centré, simulation, dynamique des dislocations, glissement dévié

OPTIMISATION OF A 3D DISLOCATION DYNAMICS CODE FOR THE STUDY OF FERRITIC STEELS PLASTICITY

The present work is part of a larger multi-scale effort aiming to increase knowledge of the physical phenomena underneath reactor pressure vessel irradiation embrittlement. Within this framework, we focused on the description of dislocation mobility in BCC iron, which is one of the key inputs to dislocation dynamics (DD) simulation codes. An extensive bibliographic review shows that none of the available expressions can deal with the ductile-fragile transition domain of interest. Here, a new screw mobility law able to reproduce the main experimental observations is introduced building on the previous models. The aforementioned law is used together with an improved dislocations dynamics code Tridis BCC 2.0, featuring both performance and dislocations segments interaction management enhancements, that allows for complex DD simulations of BCC iron structures with cross-slip

KEY WORDS : Dislocation, screw, mobility, double kink, transition, thermal, athermal, plasticity, steel, BCC iron, ferrite, body-centred cubic, simulation, dislocation dynamics, cross-slip

Table des matières

Chapitre I : Introduction générale	1
1 Contexte industriel	3
2 La démarche multi-échelle	4
3 Les simulations en Dynamique des Dislocations	6
4 Objectif et organisation du mémoire	8
5 Références.....	9
Chapitre II : Étude bibliographique de l'acier de cuve.....	11
1 Introduction.....	13
2 Composition et spécifications de base.....	13
3 Élaboration des cuves des REP.....	15
3.1 Lingots.....	15
3.2 Forgeage.....	17
3.3 Traitements thermiques.....	17
4 Microstructure.....	18
5 Comportement mécanique à l'état non irradié	22
5.1 Régimes thermiquement activé et athermique.....	22
5.2 Ténacité.....	22
6 Conclusion	26
7 References.....	27
Chapitre III : Bibliographie générale sur la mobilité des dislocations dans le fer... 29	
1 Introduction.....	31
2 Mobilité dans le régime athermique.....	32
2.1 Les mécanismes de friction par phonons.....	32
2.2 Mécanismes électroniques de friction dans les métaux	37
2.3 Dépendance avec la température et comparaison avec l'expérience pour les matériaux CFC	38
2.4 Cas du fer cubique centré	40
2.5 Discussion	43
3 La mobilité thermiquement activée des vis	44
3.1 Introduction au modèle de Peierls-Nabarro.....	44
3.2 Le modèle de doubles décrochements	45
3.3 Le modèle de « <i>locking-unlocking</i> »	66
3.4 La transition entre les mécanismes de double décrochements et de« <i>locking-unlocking</i> »	69
3.5 Observations expérimentales	72
3.6 État de l'art en dynamique des dislocations (DD)	73
4 Conclusion	81
5 Références.....	82
Chapitre IV : Amélioration du code Tridis BCC.....	87
1 Introduction.....	89
2 Amélioration de la gestion des segments de dislocation dans Tridis BCC.....	90
2.1 Introduction	90
2.2 Motivation : la simulation de référence.....	90
2.3 Systèmes de glissement considérés.....	92
2.4 Le glissement dévié dans Tridis BCC.....	93

2.5	Interaction entre segments.....	95
2.6	La division des pas de temps entre segments vis et coin	101
2.7	Discussion	101
3	Amélioration des performances du code.....	103
3.1	Introduction	103
3.2	Utilisation de la librairie mathématique BLAS.....	103
3.3	Une nouvelle méthode des boîtes	105
3.4	Le gain en performances.....	111
3.5	Discussion	115
4	Conclusion	116
5	Références.....	117
Chapitre V : Une nouvelle loi de mobilité pour les dislocations vis dans le fer		
	CC.....	119
1	Introduction.....	121
2	La limite à forte contrainte	122
2.1	Introduction	122
2.2	Le modèle basé sur l'analyse de Hirth et Lothe.....	123
2.3	Le modèle hybride H&L – G&D	127
2.4	Discussion	129
3	La limite à haute température.....	130
3.1	Introduction	130
3.2	Motivation de la démarche	132
3.3	Une nouvelle loi de mobilité avec $\Delta G(\tau, T)$	133
3.4	Discussion	139
3.5	Simulations en dynamique de dislocations	144
4	Simulations du comportement en flexion d'une latte de ferrite par DD.....	147
4.1	Illustration du sens de l'asymétrie maclage/anti-maclage.....	147
4.2	Evolution de la contrainte interne lors de la flexion d'une latte de ferrite.....	150
5	Conclusion	154
6	Références.....	156
Chapitre VI : Conclusions et Perspectives.....		159
1	Conclusions.....	161
2	Perspectives.....	163
2.1	Identifier les lois de mobilité des dislocations vis.....	163
2.2	Améliorer la loi de glissement dévié	164
2.3	Le développement de codes de dynamique des dislocations	164
2.4	Les applications envisageables de Tridis-BCC v2.0.	164
3	Références.....	165
Annexes		167
A.	Étude bibliographique sur l'endommagement par irradiation de l'acier de cuve	169
B.	Ajustement empirique de l'énergie d'activation	203
C.	Remise à niveau de Tridis BCC	213
D.	Évolution de la contrainte interne (détail).....	221
E.	Champ de contrainte d'un segment de dislocation à longue distance.....	223
F.	Valeurs numériques pour le calcul des coefficients de friction visqueuse	225
Bibliographie Générale		227
Liste de Figures et Tableaux		241

Chapitre I : Introduction générale

Table des matières

Chapitre I : Introduction générale	1
1 Contexte industriel	3
2 La démarche multi-échelle	4
3 Les simulations en Dynamique des Dislocations	6
4 Objectif et organisation du mémoire	8
5 Références.....	9

1 Contexte industriel

La cuve constitue un des éléments de sûreté majeur des réacteurs à eau pressurisée (REP). Leur mission principale est de contenir le cœur, en conditions accidentelles. Ces composants massifs sont élaborés par forgeage de grandes pièces d'acier ferritique faiblement allié, le 16MND5 [§II-2] de structure bainitique. Cet alliage offre un très bon compromis entre limite d'élasticité (sollicitée en fonctionnement normal) et ténacité (sollicitée en cas d'accident). La taille de l'ensemble dépasse la dizaine de mètres de hauteur pour 4 mètres de diamètre, avec un poids de plusieurs centaines de tonnes [§II-3].

Comme tous les aciers à base de fer cubique centré (CC), le 16MND5 présente un comportement fragile à basse température. Pour cet alliage, la température de transition ductile-fragile (TTDF) est proche de la température ambiante. Ainsi, dans le régime de fonctionnement normal du réacteur (pression de l'ordre de 155 bar et température d'environ 290°C), il ne peut pas y avoir de phénomène de rupture fragile de la cuve. Cependant, il est crucial de garantir son intégrité en cas d'accident, et cela pendant toute la durée de vie de la centrale (30 à 60 ans), puisqu'elle est la seule pièce de la centrale à ne pas pouvoir être remplacée.

Pour la cuve, l'accident le plus critique est celui d'une perte de réfrigérant du circuit primaire (APRP). Lors d'un tel événement, de l'eau à température ambiante serait injectée très rapidement pour assurer le refroidissement du cœur et éviter ainsi sa fusion. L'écart de température entre la zone trempée à l'intérieur de la cuve et sa partie extérieure générerait alors de fortes contraintes qu'il faudrait désormais supporter à plus basse température (environ 80°C). Dans cette gamme de températures, l'acier choisi est suffisamment ductile pour résister à l'état non irradié. Cependant, soumis à une irradiation neutronique continue en conditions de service, l'acier de cuve devient fragile pour des températures plus élevées qu'à l'état non irradié (Bouchet *et al.*, 2005). Cette dégradation des propriétés étant progressive, on comprend l'intérêt pour l'industrie nucléaire de prédire la durée pendant laquelle le matériau sera toujours capable de répondre aux conditions les plus exigeantes.

En amont de cette problématique industrielle, de nombreux travaux de recherche ont été engagés : ils portent notamment sur la compréhension et la modélisation des mécanismes de rupture fragile dans les aciers faiblement alliés. Le Commissariat à l'Energie Atomique (CEA) et Electricité de France (EDF) ont soutenu plusieurs thèses sur ce thème (Renevey, 1997, Carassou, 1999, Tanguy, 2001, Hausild, 2002, Pesci, 2004, Mathieu, 2006, Libert, 2007). Récemment, cette problématique a commencé à être étudiée numériquement en utilisant les codes de dynamique des dislocations (DD) que ce soit au CEA à l'occasion des travaux de Chaussidon (2007) ou encore à EDF avec les thèses de Queyreau (2008) et Naamane (2008). Les travaux présentés ici s'inscrivent dans cette démarche de compréhension des mécanismes à l'origine de la rupture fragile par clivage, et visent à compléter celle initiée par Chaussidon en améliorant la prise en compte des spécificités des alliages de fer CC dans les codes de dynamique de dislocations.

Les travaux rapportés dans cette thèse ont également été associés au projet européen PERFORM60 (*Prediction of the effects of radiation for reactor pressure vessel and in-core materials using multi-scale modeling - 60 years foreseen plant lifetime*), dont l'objectif est de modéliser les propriétés mécaniques des matériaux de la cuve ainsi que des composants internes des REP à différentes échelles allant de l'échelle atomique jusqu'à l'échelle de la structure.

2 La démarche multi-échelle

Le sujet de cette thèse se trouve au centre d'une démarche de simulations **multi-échelles** dont le but à long terme est d'identifier les mécanismes physiques à l'origine de la fragilisation par irradiation de l'acier de cuve des réacteurs à eau pressurisée (REP).

En effet, à l'échelle la plus fine, l'endommagement primaire induit par l'irradiation neutronique (voire gamma) entraîne des phénomènes se déroulant à l'échelle du noyau atomique qu'il est nécessaire de traduire à l'échelle de la cuve. Cet endommagement se constate macroscopiquement par une augmentation de la valeur de la limite d'élasticité, une perte de ductilité, ainsi que le décalage de la TTDF vers les hautes températures.

Comprendre les phénomènes physiques à l'origine de la fragilisation implique alors de relier l'endommagement primaire à la dégradation du comportement mécanique de l'alliage irradié. Or, il n'existe pas de méthode de simulation unique capable de traiter simultanément l'ensemble de ces phénomènes, d'où l'intérêt des approches multi-échelles impliquant les techniques numériques suivantes (par ordre, de l'échelle la plus fine à la plus grande, voir également la figure Fig. I-1) :

- Méthodes *ab-initio* : Partant des équations de la mécanique quantique dans le cadre de l'approximation de la fonctionnelle de densité (*Density Functional Theory*, DFT), ces méthodes fournissent des informations physiques sur les arrangements atomiques et leur structure électronique. Dans le cadre de l'irradiation, ils permettent par exemple d'ajuster des potentiels interatomiques gérant les interactions entre atomes singuliers dans un réseau cristallographique donné.
- Simulations de dynamique moléculaire (DM) : Utilisant les potentiels interatomiques semi-empiriques, pouvant être ajustés par des calculs en DFT, les modèles DM permettent de simuler le comportement de millions d'atomes en interaction (quelques nm pendant quelques ns). On distingue les simulations statiques (SM : $T = 0K$), qui déterminent les positions d'équilibre du système en minimisant l'énergie potentielle, et les simulations dynamiques (DM : $T > 0K$). Dans le domaine de l'irradiation, ces codes numériques sont capables de simuler l'endommagement primaire induit à l'échelle atomique par l'irradiation : les cascades de déplacements, ainsi que les interactions entre dislocations et défauts d'irradiations (boucles de dislocation, cavités, *etc.*).
- Cinétique chimique (*Rate Theory*, RT; *Kinetic MonteCarlo*, KMC) : Les simulations de cinétique chimique permettent d'analyser statistiquement l'évolution de l'ensemble des défauts cristallins produits lors des cascades sur de longues périodes de temps. On a ainsi accès à de nombreuses informations sur les amas d'atomes interstitiels ou de lacunes formés lors de l'irradiation dans les métaux purs, ainsi que la précipitation des éléments d'alliage dans les aciers.
- Dynamique des Dislocations (DD) : Elle permet de gérer les populations de dislocations en les traitant comme des défauts linéiques dans le cadre de la théorie de l'élasticité. En partant de la description des défauts d'irradiation (DM/RT/KMC) et des règles d'interactions dislocation/obstacle (SM/DM), elle permet d'analyser les effets du mouvement collectif des dislocations sur la plasticité d'un grain de matériau irradié.
- Eléments Finis (EF) / Mécanique des Milieux Continus : En intégrant les résultats de DD dans les lois de comportement de plasticité cristalline, les calculs par EF permettent de simuler le comportement de structures poly-cristallines complexes (allant de l'agrégat poly-cristallin jusqu'à la cuve d'un réacteur) dans des situations de chargement complexe (accidentelles).

Comme pour toute approche de simulation, les résultats générés doivent être accompagnés d'observations expérimentales qui servent non seulement à valider, mais aussi à guider le développement des outils de simulation. Dans notre cas précis, ces outils offrent en plus la possibilité de s'affranchir des échelles inférieures lorsque les résultats ne sont pas disponibles. Voici quelques-unes de techniques expérimentales dont les résultats sont liés à cette thèse :

- Moyens d'observation

- Microscope électronique à transmission (MET) : C'est l'outil d'observation le plus usité pour la caractérisation des défauts d'irradiation, puisqu'il en permet une observation directe. Cependant, la résolution des microscopes conventionnels ne permet pas d'observer des défauts de taille inférieure au nanomètre. Dans certains cas, des observations in situ permettent également d'avoir des informations sur les interactions dislocation/défauts (Caillard and Couret, 2002).
- Sonde atomique (Tomographic Atom Probe, TAP) : Elle permet des mesures « directes » de la composition chimique des amas d'atomes, leur taille, et leur distribution spatiale.
- Spectroscopie d'annihilation de positrons (Positron Annihilation Spectroscopy, PAS) et diffraction des neutrons aux petits angles (Small Angle Neutron Scattering, SANS) : Ces techniques apportent des informations indirectes sur la composition, la taille, et la distribution des défauts d'irradiation à des échelles sub-nanométriques.

- Traitements thermomécaniques

- Essais mécaniques : Ils permettent de mesurer l'endommagement à une échelle macroscopique, et apportent parfois des informations sur les modes de déformation, étroitement liés à la nature des défauts sous-jacents.
- Recuits Post Irradiation (Post Irradiation Annealing, PIA). Lorsqu'on ne peut avoir que des mesures indirectes (PAS/SANS) de la population de défauts, ou qu'on frôle la résolution ultime des MET, on pourra inférer la nature de certains défauts en suivant leur évolution lors des observations successives par ces mêmes techniques à différentes températures de recuit.

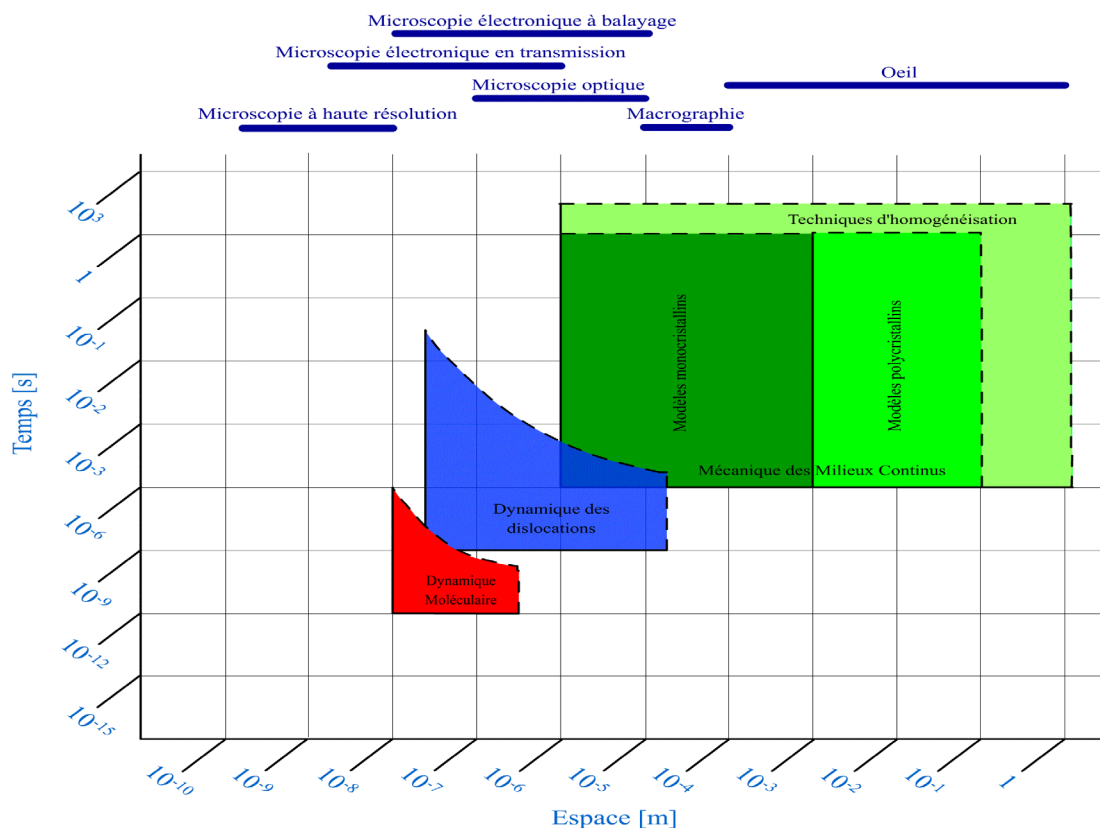


Fig. I-1: Domaine spatio-temporel atteignable par les différentes techniques de simulation et différents moyens d'observation. La DD tient une place centrale dans les simulations et permet la continuité entre la DM et la Mécanique des Milieux Continus.

Les frontières en tirets représentent la frontière des domaines d'applications des différentes techniques qui se décale constamment vers le haut à droite du graphe avec les progrès informatiques (Fivel and Forest, 2004).

3 Les simulations en Dynamique des Dislocations

Comme nous venons de l'introduire [§2], la dynamique des dislocations (DD) se place au sein d'une démarche multi-échelle [Fig. I-1], à mi-chemin entre les simulations atomiques et les modèles continus. Nous présentons ici les principes d'une simulation de DD, tels que représentés schématiquement sur la Fig. I-2.

La DD permet de tester les réponses d'une microstructure de dislocations d'un matériau soumis à une sollicitation mécanique donnée. Pour ce faire, dans un code de DD il faut introduire les éléments suivants :

- Une modélisation des dislocations, qui implique généralement une triple discrétisation :
 - o des lignes de dislocation découpées en un ensemble de « segments de dislocation », traités comme des inclusions élastiques plongées dans un milieu continu élastique.
 - o du temps en pas dont la durée est généralement comprise entre 10^{-10} et 10^{-8} s.
 - o des positions atteignables par ces dislocations, qui doivent correspondre à celles d'un réseau homothétique de la maille cristalline du matériau simulé.
- La théorie des dislocations, qui fournit les éléments nécessaires pour décrire le comportement individuel des segments de dislocation avec entre autres :
 - o les lois de mobilité, déterminant la vitesse d'une dislocation en fonction de la contrainte effective qu'il subit.
 - o les interactions entre dislocations par le biais de leurs champs de contrainte, énergies de ligne, etc.
 - o la gestion du glissement dévié, ou la possibilité d'une dislocation de changer de plan de glissement.

Une fois le modèle de DD en place, la simulation doit tenir compte des considérations microstructurales (taille et forme de la boîte de simulation) et environnementales (conditions aux limites) de chaque cas étudié. Ainsi, dans certains cas on pourra s'intéresser au comportement à cœur du matériau, et l'on introduira des conditions aux limites périodiques ; dans d'autres, on s'intéressera plutôt au comportement d'un élément microstructural tel qu'un grain ou une latte, avec des conditions aux limites adaptées.

La mise en place d'une simulation nécessite aussi des informations sur la nature et la distribution des éléments de la microstructure autres que les dislocations ayant un impact sur la plasticité, tels que des précipités ou des défauts d'irradiation. Ces informations, seront issues soit des observations expérimentales, soit des simulations aux échelles inférieures. Elles seront introduites par des règles locales d'interaction entre ces éléments et les segments de dislocations.

De la qualité des informations introduites dans le modèle de DD dépendra la pertinence des résultats obtenus vis-à-vis du comportement du matériau réel. Ainsi, ce travail s'inscrit dans une démarche d'amélioration des simulations de DD dans le cas des aciers ferritiques. Parmi les différents éléments ci-dessus, nous avons porté notre attention sur la loi de mobilité des dislocations dans le fer CC, et dans une moindre mesure, sur l'amélioration du code de calcul et la prise en compte du glissement dévié propre à ce type de matériaux.

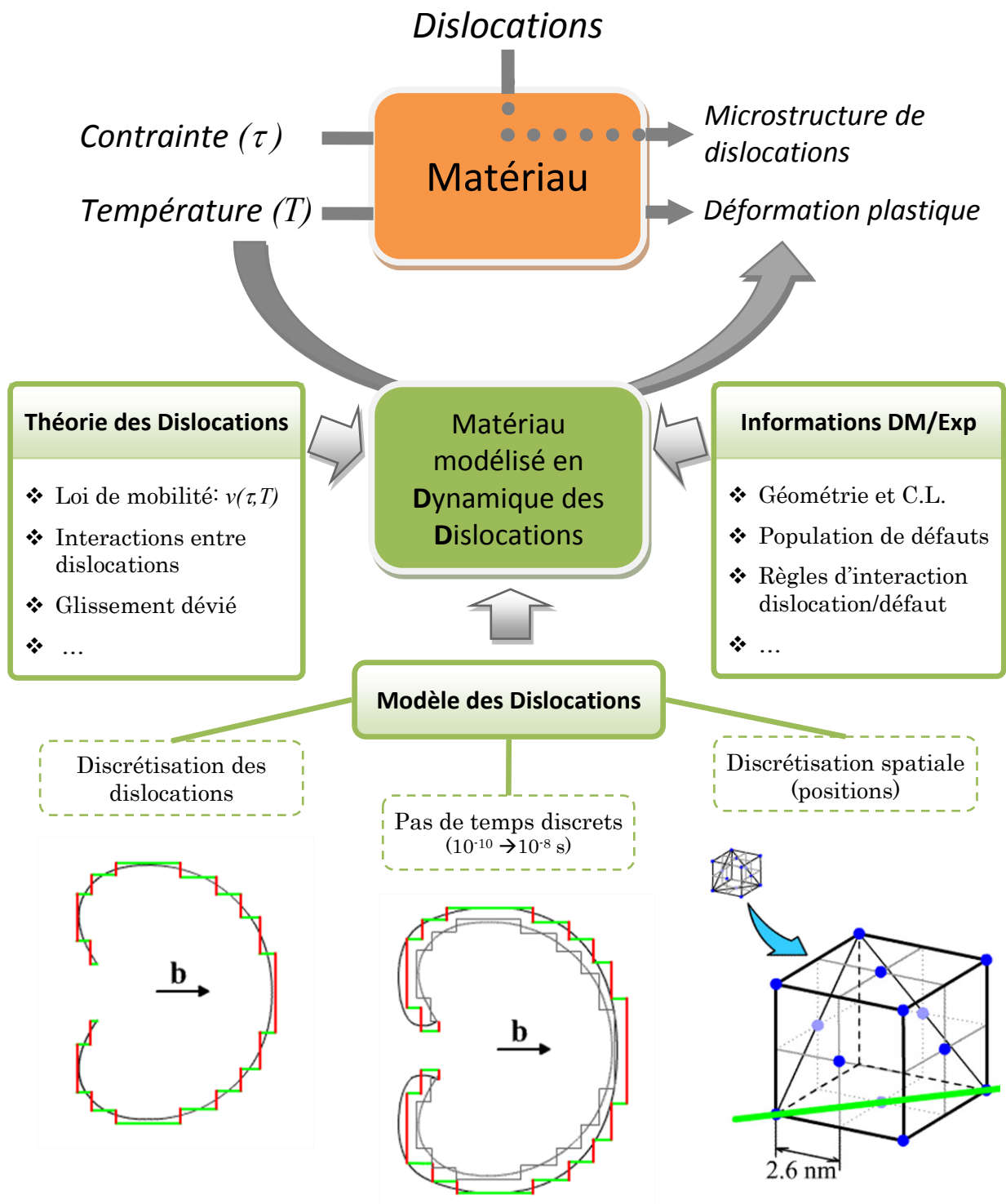


Fig. I-2 : Diagramme de principe d'une simulation en dynamique des dislocations (DD) [§3]

4 Objectif et organisation du mémoire

Dans le cadre de la démarche introduite dans les sections précédentes, nous avons divisé ce manuscrit en cinq chapitres :

- Nous commençons (**deuxième chapitre**) par présenter en détail le matériau étudié dans cette thèse, son élaboration, sa microstructure, et ses caractéristiques principales.
- Dans le **troisième chapitre** nous revisitons en détails une des caractéristiques clés pour expliquer la fragilité du fer CC à basse température : la mobilité des dislocations vis, dont nous parcourons l'état de l'art. L'expression de cette mobilité en fonction de la contrainte et la température est l'une des entrées fondamentales du nouveau code de DD développé dans cette thèse.
- Dans le **quatrième chapitre** nous présentons les diverses améliorations que nous avons apportés au code de dynamique de dislocations utilisé lors des travaux de thèse (Tridis BCC), notamment en ce qui concerne sa performance et la gestion des segments de dislocation en prenant en compte le glissement dévié dans le fer CC.
- Dans le **cinquième chapitre** nous proposons une nouvelle loi de mobilité pour les dislocations vis, dont la particularité est de réussir à faire la transition du domaine fragile (basse température) vers le domaine ductile (haute température). Nous présentons finalement deux exemples d'application du code avec la nouvelle loi de mobilité dans le cas d'une latte de ferrite chargée en flexion. Le premier exemple concerne l'influence du glissement dévié à basse (77K) et haute (293K) température, et le deuxième porte sur l'analyse de l'évolution de la contrainte interne sur les plans de clivage à 50K et 200K.

5 Références

- BOUCHET, C., TANGUY, B., BESSON, J. & BUGAT, S. 2005. Prediction of the effects of neutron irradiation on the Charpy ductile to brittle transition curve of an A508 pressure vessel steel. *Computational Materials Science*, 32, 294-300.
- CAILLARD, D. & COURET, A. 2002. Dislocation movements controlled by friction forces and local pinning in metals and alloys. *Materials Science and Engineering a-Structural Materials Properties Microstructure and Processing*, 322, 108-117.
- CARASSOU, S. 1999. *Déclenchement du clivage dans un acier faiblement allié : Rôle de l'endommagement ductile localisé autour des inclusions*. Docteur en Sciences et Génie des Matériaux Thesis (PH D), Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris.
- CHAUSSIDON, J. 2007. *Etude multiéchelle de la plasticité du fer alpha à basse température*. Doctorat de l'INP Grenoble Thesis (PH D), Grenoble INP - ED "Matériaux et Génie des Procédés".
- FIVEL, M. & FOREST, S. 2004. Plasticité cristalline et transition d'échelle. *Techniques de l'Ingénieur*. ETI Sciences & Techniques, M4018.
- HAUSILD, P. 2002. *Transition ductile-fragile dans un acier faiblement allié*. Doctorat de l'École Centrale Paris Thesis (PH D), Ecole Centrale Paris.
- LIBERT, M. 2007. *Etudes expérimentale et numérique de l'effet des mécanismes de plasticité sur la rupture fragile par clivage dans les aciers faiblement alliés*. Doctorat de l'École Centrale de Paris Thesis (PH D), Ecole Centrale de Paris.
- MATHIEU, J.-P. 2006. *Analyse et modélisation micromécanique du comportement et de la rupture fragile de l'acier 16MND5 : Prise en compte des hétérogénéités microstructurales*. Doctorat de l'Ecole Nationale Supérieure d'Arts et Métiers Thesis (PH D), Ecole Nationale Supérieure d'Arts et Métiers.
- NAAMANE, S. 2008. *Etude de la déformation plastique de la ferrite à basse température: simulations de dynamique des dislocations*. Doctorat de l'Université Pierre et Marie Curie Thesis (PH D), Université Pierre et Marie Curie.
- PESCI, R. 2004. *Etude micromécanique et caractérisation expérimentale du comportement et de l'endommagement de l'acier de cuve 16MND5 à basses températures*. Doctorat de l'Ecole Nationale Supérieure d'Arts et Métiers Thesis (PH D), Ecole Nationale Supérieure d'Arts et Métiers.
- QUEYREAU, S. 2008. *Étude des Mécanismes d'Écrouissage Sous Irradiation de la Ferrite par Simulations de Dynamique de Dislocations*. Doctorat de l'Université Pierre et Marie Curie Thesis (PH D), Université Pierre et Marie Curie.
- RENEVEY, S. 1997. *Approches globale et locale de la rupture dans le domaine de transition fragile-ductile d'un acier faiblement allié*. Docteur en métallurgie et matériaux de l'Université Paris XI Orsay Thesis (PH D), Université Paris XI Orsay.
- TANGUY, B. 2001. *Modélisation de l'essai Charpy par l'approche locale de la rupture. Application au cas de l'acier 16MND5 dans le domaine de transition*. Doctorat de l'Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris Thesis (PH D), Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris.

Chapitre II : Étude bibliographique de l'acier de cuve

Table des matières

Chapitre II : Étude bibliographique de l'acier de cuve	11
1 Introduction	13
2 Composition et spécifications de base.....	13
3 Élaboration des cuves des REP.....	15
3.1 Lingots.....	15
3.2 Forgeage.....	17
3.3 Traitements thermiques.....	17
4 Microstructure.....	18
5 Comportement mécanique à l'état non irradié	22
5.1 Régimes thermiquement activé et athermique.....	22
5.2 Ténacité.....	22
6 Conclusion	26
7 References.....	27

1 Introduction

Dans ce chapitre nous présentons le matériaux visé par ces travaux de thèse, l'acier de cuve faiblement allié dénommé 16MND5 en France (norme AFNOR)[Fig. II-1], A508CL3 (forgé) ou A533B (laminé) aux États-Unis.

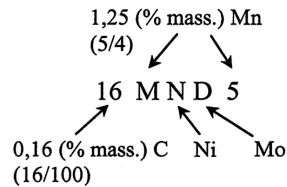


Fig. II-1: Nomenclature AFNOR pour l'acier de cuve 16MND5

Historiquement, les aciers des cuves REP françaises ont été développés s'inspirant de ceux utilisés aux États-Unis depuis les années 60, à partir de la licence Westinghouse. Différentes nuances et traitements thermiques ont été ainsi développés pour répondre à un cahier des charges complexe avec des exigences parfois difficiles à concilier. Ces aciers doivent entre autre respecter (Benhamou *et al.*, 2008) :

- un bon compromis entre les **propriétés mécaniques** :
 - o de traction, pour supporter la pression interne de l'eau de 155 bar à des températures qui varient entre 293 et 328 °C pour les zones basse et haute respectivement.
 - o de ténacité, pour maintenir son intégrité en situation accidentelle.
- une bonne aptitude à la **soudure**, pour fabriquer la cuve à partir de viroles forgées.
- une bonne résistance à la fragilisation par l'**irradiation**, puisque la cuve est soumise au flux neutronique du cœur (1,25 dpa sur 60 ans pour le plus récent *European Pressurized Reactor*, EPR).
- une bonne tenue à la **corrosion** généralisée dans le milieu aqueux du circuit primaire de la centrale. Ceci est cependant assuré par un revêtement en acier inoxydable.
- une structure métallurgique aussi **homogène** que possible pour ne pas avoir de points faibles, ou à défaut très bien connue.

Pour assurer l'ensemble de ces caractéristiques, ils doivent en outre supporter les différents traitements thermiques [§3.3] nécessaires à l'obtention de la microstructure et des propriétés souhaitées. Dans cette partie, nous décrirons l'acier 16MND5, pour lequel nous rappellerons sa composition [§2], le processus d'obtention [§3], et les caractéristiques microstructurales [§4] et mécaniques [§5] qui en résultent.

2 Composition et spécifications de base

Le cahier des charges ci-dessus a conduit au choix d'aciers contenant du manganèse (pour améliorer l'aptitude à la soudure), du nickel et du molybdène (qui améliorent la trempabilité et donc les propriétés mécaniques), qui ont évolué au cours du temps avec le concours des nombreux acteurs du nucléaire (Cadiou *et al.*, 1977).

Dans l'évolution de ces nuances, on a surtout cherché à diminuer la teneur en **impuretés**, responsables de la fragilisation de l'alliage à plusieurs niveaux. Citons trois exemples :

- le phosphore (P) est susceptible de ségréger aux joints de grains lors des traitements thermiques et/ou sous irradiation, fragilisant ainsi l'acier.
- le soufre (S) conduit à la formation d'inclusions micrométriques non métalliques. Ces inclusions, surtout des sulfures de manganèse (MnS), jouent un rôle dans le processus de rupture ductile (Lautridou and Pineau, 1981, Tanguy, 2001, Pesci, 2004), ainsi que dans celui de rupture fragile (Renevey, 1997, Rossoll, 1998, Mantyla *et al.*, 1999, Carassou, 1999).

- le cuivre (Cu), comme nous le verrons par la suite, est le principal élément à l'origine de la fragilisation par irradiation dans les premiers aciers de cuve (Miloudi, 1997).

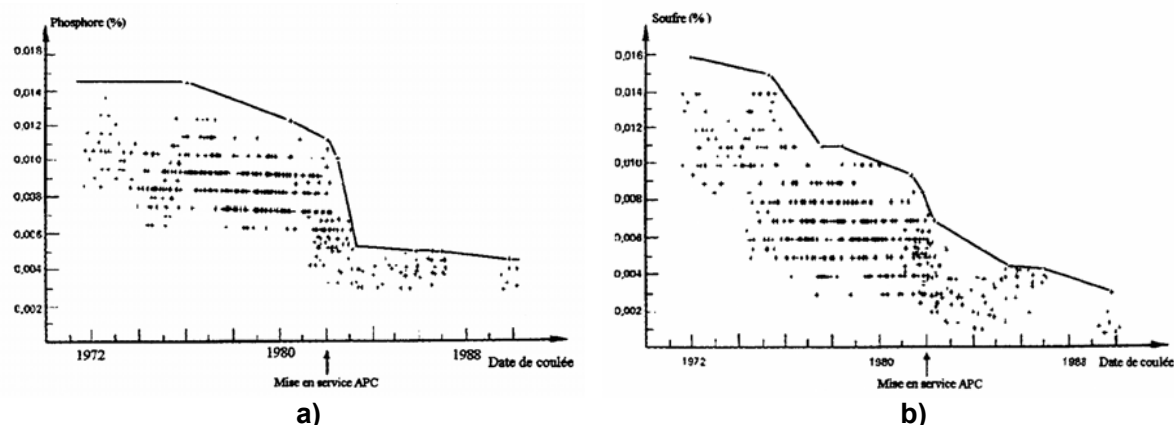


Fig. II-2 : Évolution des teneurs en phosphore (a) et soufre (b) dans l'acier 16MND5 entre 1970 et 1990 (Bocquet *et al.*, 1994).

La Fig. II-2 montre la diminution des teneurs en P et S dans les coulées des aciers de cuve utilisées par EDF entre 1972 et 1990.

En ce qui concerne la nuance 16MND5 plus récente, sa **composition** chimique rappelée dans le Tableau II-1 et ses **caractéristiques mécaniques** données dans le Tableau II-2 sont spécifiées dans les Règles de Conception et de Construction des Matériels mécaniques des îlots nucléaires REP (RCC-M 2007).

Analyse	C	S	P	Mn	Si	Ni	Cr	Mo	V	Cu	Co	Al
Coulée	≤ 0.20	≤ 0.005	≤ 0.008	1.15 1.55	0.10 0.30	0.50 0.80	≤ 0.25	0.45 0.55	≤ 0.01	≤ 0.08	≤ 0.03	≤ 0.04
Produit	≤ 0.22	≤ 0.005	≤ 0.008	1.15 1.60	0.10 0.30	0.50 0.80	≤ 0.25	0.43 0.57	≤ 0.01	≤ 0.08	≤ 0.03	≤ 0.04

Tableau II-1 : Spécification RCC-M (2007) pour la composition chimique moyenne de l'acier 16MND5

Type d'essai	Temp. (°C)	Caractéristique	Valeur requise	
			Direction Axiale (T)	Direction Circonf. (L)
Traction	Ambiante	R _{p0.2}	-	≥ 400 MPa
		R _m	-	≥ 550/670 MPa
		A	-	≥ 20%
	350	R _{p0.2}	-	≥ 300 MPa
		R _m	-	≥ 497 MPa
Résilience (KCV)	0	Valeur min. moyenne	80 J	80 J
		Valeur min. individuelle ¹	60 J	60 J
	- 20	Valeur min. moyenne	40 J	56 J
		Valeur min. individuelle ¹	28 J	40 J
	+20	Résilience (+20°C)	104 J	120 J

⁽¹⁾ Il n'est accepté qu'un résultat au plus inférieur à la valeur moyenne minimale dans chaque série de 3 éprouvettes

Tableau II-2 : Spécifications pour les caractéristiques mécaniques de l'acier 16MND5. Les essais sont à réaliser selon la procédure et avec les éprouvettes décrites dans le chapitre MC1000 (AFCEN, 2007). Trois éprouvettes sont analysées pour chaque cas dans les essais de résilience contre une seule pour les essais de traction.

3 Élaboration des cuves des REP

Les cuves des réacteurs à eau pressurisée (REP) sont constituées d'un assemblage de viroles forgées soudées les unes aux autres. La Fig. II-3 montre une structure commune avec deux viroles de cœur (C1 et C2), une virole porte-tubulure (B), et deux calottes (Cadiou *et al.*, 1977). Le Tableau II-3 montre l'évolution des dimensions moyennes des réacteurs REP en France, avec notamment une augmentation progressive du diamètre.

Cuve	Diamètre intérieur	Epaisseur	Hauteur totale	Poids
900 MWe	3.9 m	200 mm	13.2 m	329 t
1300 MWe	4.4 m	219 mm	13.6 m	418 t
EPR (1600 MWe)	4.9 m	250 mm	12.7 m	580 t

Tableau II-3 : Évolution des dimensions de la cuve des réacteurs REP depuis le 900 MWe jusqu'à l'EPR.

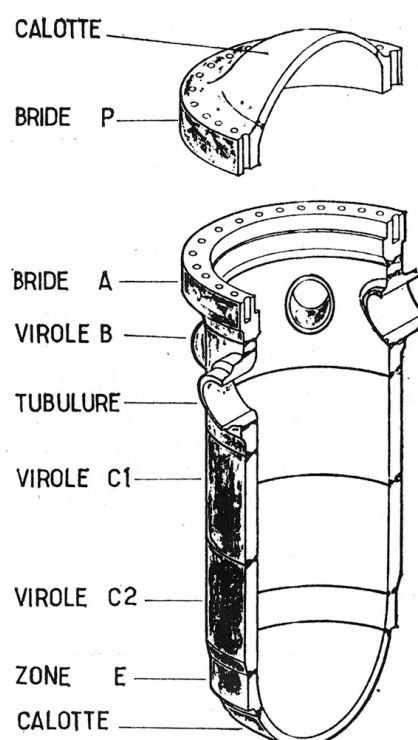


Fig. II-3 : Eléments d'une cuve de réacteur à eau pressurisée (REP). On distingue les deux viroles de cœur (C1 et C2), la virole porte tubulure (B), et les deux calottes supérieure et inférieure (Cadiou *et al.*, 1977).

3.1 Lingots

Chaque virole est fabriquée à partir d'un lingot unique à fort tonnage (jusqu'à 486 T pour la virole porte tubulure des EPR, (Benhamou *et al.*, 2007)). Ces lingots sont formés à partir de ferrailles sélectionnées pour limiter les impuretés et amenées à fusion en four électrique.

De par sa taille, la **solidification** à température ambiante des lingots se fait progressivement des parois vers le cœur et requiert plusieurs jours, ce qui induit des fortes ségrégations d'éléments d'alliage [Fig. II-4]. On distingue ainsi des macro-ségrégations (positive et négative) au niveau du cœur pouvant aller jusqu'à des taux de 45% (Bocquet *et al.*, 1994), mais aussi des méso-ségrégations en périphérie, dites « veines sombres » de par leur apparence lors des observations au microscope optique après attaque chimique au Nital. Dans le cas des

viroles de la cuve, l'essentiel de la macro-ségrégation est éliminée par perçage à chaud lors du forgeage, mais ce n'est pas le cas des veines sombres, qui restent exposées en paroi interne des viroles. Afin de régler ce problème, des lingots creux permettant de confiner les zones ségréguées dans l'épaisseur du matériau ont été développés [Fig. II-5]. Ce sont ces derniers qui restent envisagés pour les cuves d'EPR.

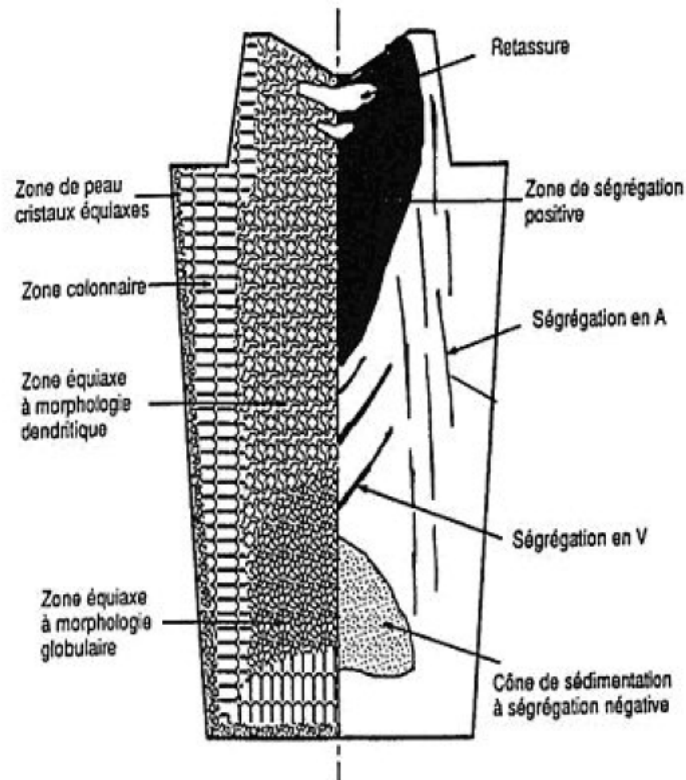


Fig. II-4 : Structure de solidification d'un lingot pour fabrication de viroles de cuve de REP. On distingue la zone de ségrégations majeure (positive et négative) au centre, ainsi que les ségrégations mineures ou veines sombres (A) en périphérie (Bocquet *et al.*, 1994).

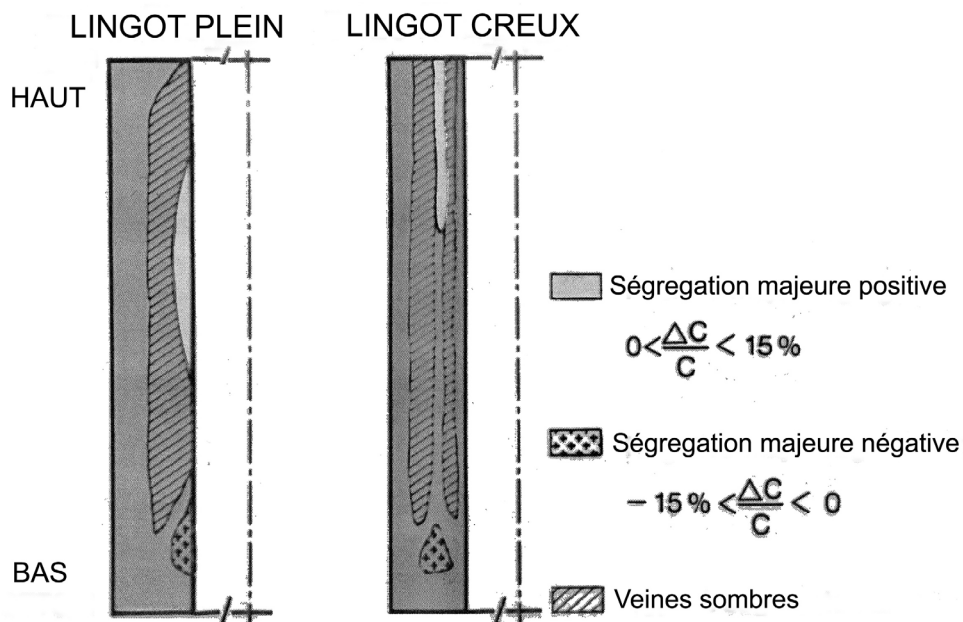


Fig. II-5 : Distribution comparée des singularités sur une pièce creuse issue d'un lingot plein ou creux (Benhamou *et al.*, 2008).

3.2 Forgeage

Pour une cuve traditionnelle élaborée à partir d'un lingot plein le forgeage se réalise à des températures entre 1000 et 1300°C en plusieurs étapes (Bethmont, 1988). On effectue d'abord un bloomage suivi de l'élimination des chutes aux extrémités, auxquels suivent les opérations d'écrasement et perçage. Les dimensions finales sont fixées par un étirage sur mandrin et un bigornage à chaud, dont l'ordre est parfois inversé. Dans l'actualité, le code RCC-M (2007) impose un taux de corroyage global supérieur à 3, afin de conférer aux pièces les propriétés mécaniques souhaitées.

3.3 Traitements thermiques.

La ténacité des aciers faiblement alliés est fortement liée à des facteurs tels que la taille des grains ou la microstructure issue de la trempe. Ainsi, pour conférer à la cuve les propriétés requises en service, les pièces forgées subissent trois traitements thermiques successifs. On distingue (Tahar, 1998, Naudin, 1999, Benhamou *et al.*, 2008) :

- **Le traitement de précaution** ou normalisation, dont le but est d'homogénéiser la pièce forgée. Il sera suivi d'un contrôle par ultrasons et comporte les opérations de :
 - o Refroidissement lent au four après forgeage, jusqu'à 350°C.
 - o Austénitisation à 900 – 950°C pendant au moins 6 heures, pour remettre en solution solide les carbures précipités lors du refroidissement après forgeage.
 - o Trempe à l'eau salée activée jusqu'à 350°C pendant 20 à 42 minutes.
 - o Revenu vers 650°C pendant au moins 6 heures.
 - o Refroidissement au four ou à l'air.
- **Le traitement de qualité**, dont dépendent les propriétés métallurgiques du matériau final. C'est après ce traitement que l'on prélève un « anneau de recette » qui servira à caractériser le matériau de référence et aux études R&D postérieures (d'une hauteur de 80mm pour une cuve de REP 1300MWe). Ce traitement thermique sera suivi du soudage des viroles entre elles, et comporte les opérations de :
 - o Austénitisation à 865 - 890°C, avec un maintien de 3 heures à 5 heures, qui permet entre autres d'affiner la taille des grains.
 - o Trempe à l'eau par immersion pendant 58 à 62 minutes, qui lui confère la structure bainitique requise. La vitesse de refroidissement n'étant cependant pas homogène, des différences microstructurales apparaissent dans l'épaisseur (Pelli *et al.*, 1983), avec notamment la formation d'une croûte martensitique que l'on chute après la trempe.
 - o Revenu 635 - 655°C, avec un maintien de 5h30, réalisé pour atténuer les différences microstructurales issues de la trempe.
 - o Refroidissement au four ou à l'air.
- **Le traitement de détensionnement**, effectué après soudage des viroles afin de relaxer les contraintes de soudage et d'atténuer les différences entre pièces soudées. Il consiste en un revenu à 615°C pendant 10 heures, suivi d'un refroidissement lent à 20°C/h.

On notera ici que le traitement de détensionnement n'est pas appliqué à l'anneau de recette dont on tire les coupons utilisés dans la caractérisation des cuves. Celui-ci doit donc suivre un traitement thermique dit de « détensionnement simulé » pour prendre en compte les effets du soudage et le traitement de revenu qui en suit. Ce traitement se caractérise par :

- Une mise au four entre 150 et 200°C.
- Un chauffage à 55°C/h jusqu'à 550°C, suivi d'un maintien d'au moins 8 heures.
- Un chauffage à 30°C/h jusqu'à 615°C, suivi d'un maintien d'au moins 16 heures.
- Un refroidissement à 30°C/h jusqu'à 315°C, puis air calme.

4 Microstructure

D'une manière générale, loin des zones de soudure et à part la présence des veines sombres et des inclusions, la microstructure des viroles de la cuve est de type **bainitique revenue** [Fig. II-6]. En effet, dans ce type d'aciers la transformation bainitique des phases austénitiques a lieu pour des trempes à températures entre 300°C et 600°C, et pour des vitesses de refroidissement relativement élevées (si les vitesses sont trop importantes ou les températures trop basses on aboutit à de la martensite). C'est le cas du traitement de qualité détaillé plus haut, qui sera suivi d'un revenu, d'où l'appellation de « bainite revenue ». La transformation bainitique se caractérise par une croissance de lattes de ferrite à partir des joints de grain austénitiques, des lattes que l'on peut regrouper par paquets de lattes, au sein desquels leur désorientation est très faible. Au cours de la transformation, l'austénite restante devient sursaturée en carbone, qui précipite sous forme de cémentite (Fe_3C) ou de carbures ϵ (Fe_xC avec $x = 2,3 - 3$). La première présente des formes sphéroïdales ou d'aiguilles de diamètre moyen 0.1 mm (Renevey, 1997, Robertson *et al.*, 2007), alors que les deuxièmes ne se présentent que sous forme d'aiguilles (Hausild, 2002).

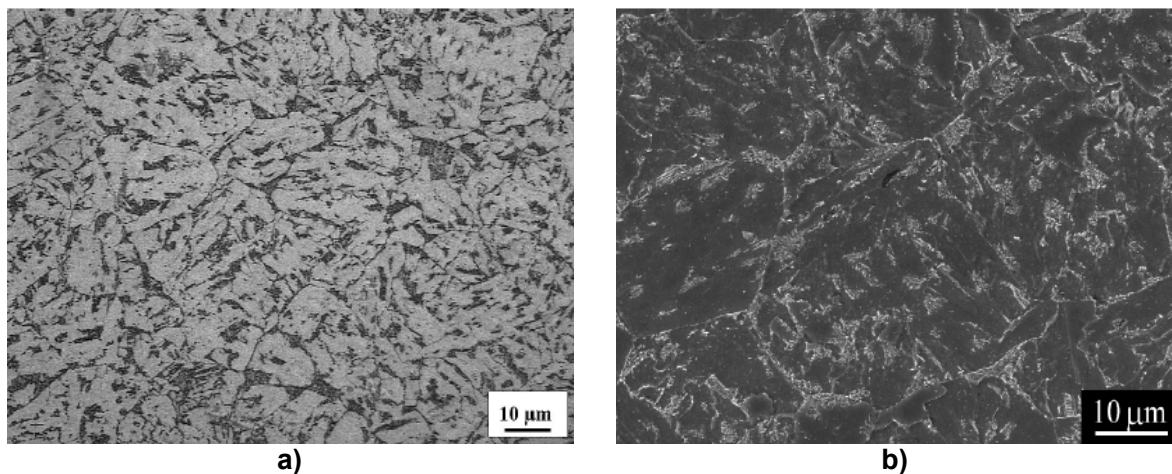


Fig. II-6 : Microstructure de l'acier 16MND5 d'une virole de REP : **a)** microscopie optique, attaque au bisulfite de sodium ; **b)** microscopie électronique à balayage, attaque au Nital 2% (Hausild, 2002).

Cependant, comme nous l'avons vu, l'élaboration des cuves de REP est très complexe et les viroles réalisées en acier 16MND5 sont d'une taille très importante. Ainsi, les conditions de trempe sont variables, et la microstructure qui en résulte n'est pas homogène. On retrouve donc différents types de bainites selon la zone étudiée, dont :

- les **bainites supérieure et inférieure** (Ohmori *et al.*, 1974, Barralis and Maeder, 1997) [Fig. II-7], qui se forment dans les zones à forte ou moyenne teneur en carbone et subissant des refroidissements isothermes. La bainite supérieure apparaît à plus haute température (~600°C) et se caractérise par la présence de cémentite entre les lattes, alors que la bainite inférieure apparaît en dessous de 500 °C et contient de la cémentite et des carbures ϵ en position intra-latte.
- les **bainites granulaire et aciculaire** (aussi appelée ferrite aciculaire), qui se forment dans les zones appauvries en carbone et autres éléments d'alliage (Gourgues *et al.*, 2000, Simonet, 2006).
 - o La granulaire apparaît dans les zones soumises à des refroidissements relativement lents à haute température. Dans ce cas, le carbone a le temps de diffuser vers l'austénite, ce qui empêche la formation de cémentite. La microstructure résultante se compose de lattes de ferrite sans carbures et d'îlots martensite-austénite saturés en carbone.
 - o L'aciculaire se forme pour des températures plus faibles et des vitesses de refroidissement plus élevées. La diffusion du carbone étant difficile dans ces conditions, il s'accumule dans les interfaces ferrite-austénite et précipite aux joints de latte.

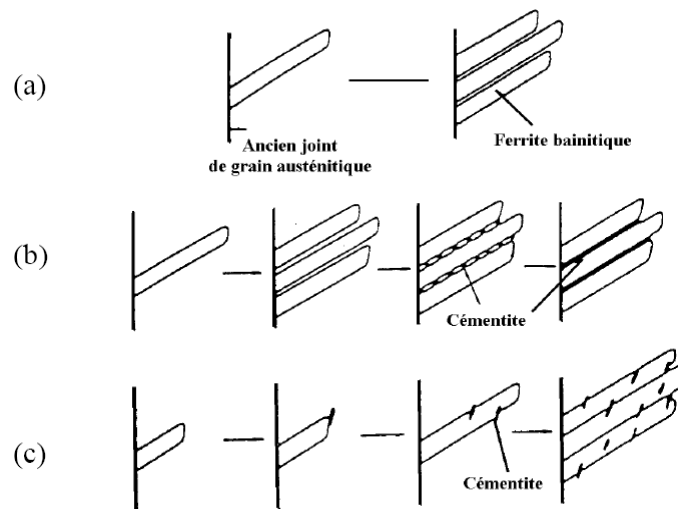


Fig. II-7 : Croissance de la ferrite bainitique à partir de l'ancien joint de grain austénitique **(a)** ; précipitation de la cémentite dans la bainite supérieure **(b)** ou inférieure **(c)** (Ohmori *et al.*, 1974).

Ainsi, dans la littérature on retrouve des études sur les viroles en acier 16MND5 montrant de la bainite inférieure (Mathieu, 2006), supérieure (Obertlik *et al.*, 2005, Robertson *et al.*, 2007), supérieure et inférieure (Renevey, 1997, Miloudi, 1997, Tanguy, 2001, Pesci, 2004), supérieure et aciculaire (Hausild, 2002), et granulaire (Sestier, 1998, Pelli *et al.*, 1983, dans l'A533B).

Par ailleurs, les analyses par diffraction d'électrons rétrodiffusés (*Electron backscattering diffraction*, EBSD) ont montré qu'il n'y a pas de **texture** cristallographique marquée (Hausild, 2002, Nohava *et al.*, 2002, Mathieu, 2006), ce qu'on explique par l'efficacité des traitements thermiques suivis. On distingue toutefois entre deux **types de paquets** de lattes de ferrite, définis par Gourgues (2000) comme :

- des « paquets morphologiques », qui sont ceux visibles comme des entités séparées en microscope optique ou électronique.
- des « paquets cristallographiques », qui sont ceux dont l'orientation cristalline est bien différenciée, visibles en EBSD.

Les différentes études sur la bainite ont montré que ces deux types de paquets ne sont pas toujours coïncidents (Gourgues *et al.*, 2000, Hausild, 2002, Nohava *et al.*, 2002, Mathieu, 2006), d'où l'intérêt de les différencier [Fig. II-8]. Certains auteurs comme Hausild constatent un enchevêtrement entre les deux types de paquets (observations sur bainite supérieure), alors que Mathieu propose que les paquets morphologiques sont des sous-ensembles de paquets cristallographiques (observations sur bainite inférieure).

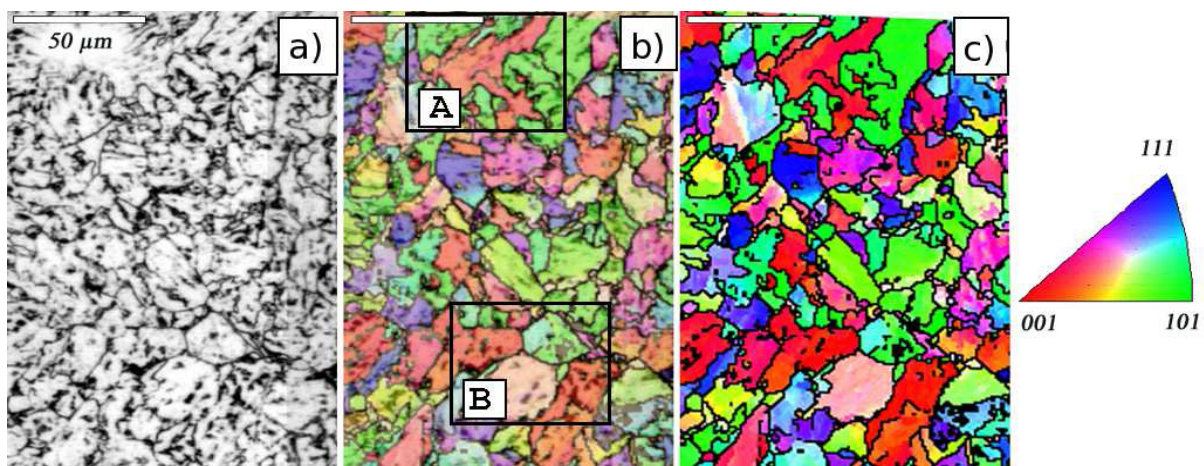


Fig. II-8 : Deux observations d'un même échantillon de bainite inférieure revenue : **a)** au microscope optique après attaque au Nital ; **c)** par technique EBSD ; **b)** superposition des deux images (Mathieu, 2006).

La **désorientation des lattes de ferrite** se caractérise par une distribution dite « bimodale », avec une différence très marquée entre les désorientations des lattes au sein d'un même paquet ($<15^\circ$) et celles entre paquets différents ($\sim 50-60^\circ$) [Fig. II-9]. Le Tableau II-4 résume les mesures recueillies dans la littérature pour l'acier 16MND5. Des études ont montré que les joints de paquets cristallographiques constituent des barrières fortes pour la propagation des fissures, ce qui n'est pas le cas des grains morphologiques faiblement recouverts par des carbures (Nohava *et al.*, 2002). Dans le cas de la bainite supérieure, le taux de recouvrement par carbures des interfaces des lattes est cependant suffisant (60-80%) pour bloquer l'avancée de fissures (Nohava *et al.*, 2002) et le mouvement des dislocations (Robertson *et al.*, 2007), même entre grains d'un même paquet cristallographique.

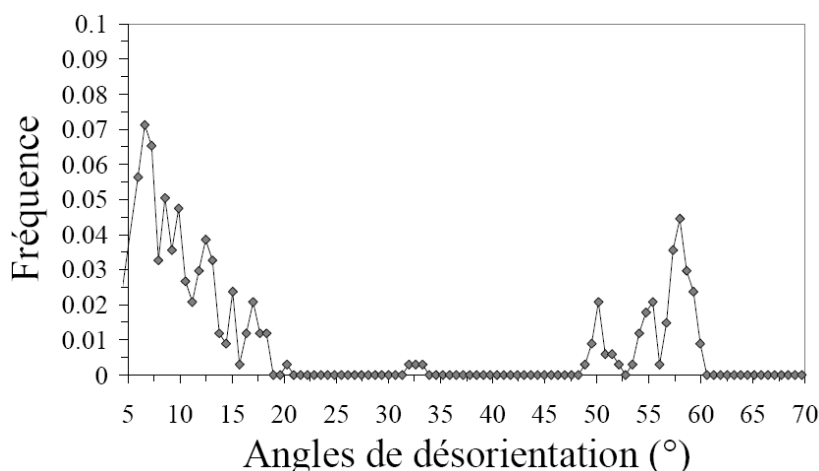


Fig. II-9 : Mesures pas EBSD de la distribution des angles de désorientation entre lattes dans un ancien grain austénitique d'un acier 16MND5 à microstructure de bainite revenue (Hausild, 2002).

Observation	Étude	Analyse	Type de bainite	Estimation
Désorientation des lattes dans un paquet	Bouyne (1999)	EBSD	Supérieure	$< 8^\circ$
	Gourgues <i>et al.</i> (2000)	EBSD	Inférieure	$< 7^\circ$
			Supérieure	$< 17^\circ$
	Haušild (2002)	EBSD	Supérieure	$< 17^\circ$
	Diawara (2007)	EBSD	Inférieure	$< 0.8^\circ$
	Robertson (2007)	MET	Supérieure	$< 5^\circ$
Désorientation des lattes entre paquets différents	Bouyne (1999)	EBSD	Supérieure	$50^\circ - 60^\circ$ (pics à 55° et 60°)
	Gourgues <i>et al.</i> (2000)	EBSD	Inférieure	$50^\circ - 60^\circ$ (pic à 60°)
			Supérieure	$47^\circ - 60^\circ$ (pics à 55° et 60°)
	Haušild (2002)	EBSD	Supérieure	$48^\circ - 60^\circ$ (pics à 50° , 55° et 58°)
	Diawara (2007)	EBSD	Inférieure	$50^\circ - 60^\circ$

Tableau II-4 : Mesures de désorientation des lattes de bainite dans un même paquet cristallographique et dans des paquets différents pour l'acier 16MND5 des viroles de cuve REP.

Le Tableau II-5 présente les **dimensions caractéristiques** des éléments de la microstructure relevés par plusieurs études. Les tailles des anciens grains austénitiques mesurées varient entre 20 et 40 μm , avec des diamètres moyens de paquets de lattes cristallographiques ($\sim$ longueur des lattes individuelles) d'environ 10 μm dans la bainite supérieure et jusqu'à 20 μm dans la bainite inférieure. L'épaisseur des lattes individuelles est mesurée entre 1 et 2 μm pour les deux cas. N'ayant pas observé de texture cristallographique marquée, il est fréquemment supposé que les lattes ont une profondeur similaire à leur longueur ($\sim 10 - 20 \mu\text{m}$) (Robertson *et al.*, 2007).

Observation	Étude	Analyse	Type de bainite	Estimation (μm)
Épaisseur moyenne des lattes	Haušild (2002)	EBSD	Supérieure	1-2
	Nohava (2002)	EBSD	Supérieure	2
	Diawara (2007)	EBSD	Inférieure	0.8-1.5
Diamètre moyen des paquets de lattes	Bouyne (1999)	EBSD	Supérieure	8
	Haušild (2002)	EBSD	Supérieure	10
	Nohava (2002)	EBSD	Supérieure	10
	Diawara (2007)	EBSD	Inférieure	10-20
Taille du grain austénitique	Tahar (1998)	MET	-	20-30
	Haušild (2002)	MET	Supérieure	30-40
	Diawara (2007)	MET	Inférieure	20-40

Tableau II-5 : Mesures des dimensions caractéristiques des éléments de la microstructure bainitique de l'acier 16MND5 dans les viroles des cuves REP.

En conclusion de cette partie, nous retiendrons que, de par les dimensions des viroles et leur mode de fabrication, la microstructure bainitique revenue de l'acier de cuve de composition 16MND5 n'est pas homogène. On retrouve ainsi différents types de bainite, avec des lattes de ferrite de taille $10-20 \times 10-20 \times 1-2 \mu\text{m}$ agroupées par paquets de 5 à 10 lattes très fortement désorientées ($50-60^\circ$). Les désorientations entre lattes dans un même paquet sont très faibles ($<10^\circ$). Le carbone précipite majoritairement en cémentite (Fe_3C) avec des formes d'aiguille ou sphériques de diamètre moyen 0,1 μm , parfois entre les lattes (bainite supérieure et aciculaire), et parfois au sein des lattes (bainite inférieure) ou au sein de l'austénite résiduelle (bainite granulaire).

On notera finalement que ces différentes microstructures possibles ont naturellement conduit à des modèles matériau différents. Ainsi, parmi les études qui précèdent cette thèse on citera les modélisations par dynamique des dislocations de :

- Chaussidon (2007) au CEA, qui a préféré la bainite supérieure ou aciculaire et simulé une latte de dimensions $10 \times 10 \times 2 \mu\text{m}$ en flexion, avec des parois impénétrables pour les dislocations représentant un fort taux de recouvrement de carbures précipités entre les lattes.
- l'équipe d'EDF qui a privilégié la configuration de bainite inférieure, en étudiant le durcissement induit par les précipités de carbures intra-latte à basse (Naamane, 2008) et haute (Queyreau, 2008) température, tout en faisant abstraction de la géométrie des lattes en soit.

5 Comportement mécanique à l'état non irradié

5.1 Régimes thermiquement activé et athermique

A l'échelle macroscopique, de nombreuses études expérimentales ont été menées depuis la fin des années 90 pour étudier le comportement mécanique de l'acier de cuve 16MND5 (Renevey, 1997, Carassou, 1999, Tanguy, 2001, Hausild, 2002, Mathieu, 2006, Libert, 2007). A travers ces études, on a mis en évidence deux régimes bien distincts et similaires à ceux que l'on retrouve dans la ferrite ou d'autres matériaux à structure CC tels que le tantale, le niobium, ou le molybdène :

- Le domaine dit « thermiquement activé » se caractérise par une forte dépendance du comportement mécanique avec la température, et correspond au domaine de rupture fragile de l'alliage.
- Le domaine dit « athermique » se caractérise par un comportement proche à celui des alliages à base de fer CFC, avec une faible dépendance en température et un mode de rupture ductile.

La transition entre les deux se fait à une température étroitement liée à la TTDF et qui dépend de la vitesse de déformation. Pour des essais de traction typiques ($\dot{\epsilon} \approx 10^{-4} \text{ s}^{-1}$), elle se situe aux alentours de 300K (Mathieu, 2006, Libert, 2007).

En ce qui concerne la durée de vie de la cuve, on s'intéresse tout particulièrement au mode de rupture fragile, et donc au régime thermique et sa transition vers le régime athermique. Dans ce sens, Libert (2007) a étudié l'évolution avec la température de la limite d'élasticité en traction. La Fig. II-10 montre qu'elle augmente très fortement (450MPa $\rightarrow$ 1000 MPa) lorsque la température diminue de l'ambiante (298K) jusqu'à 77K.

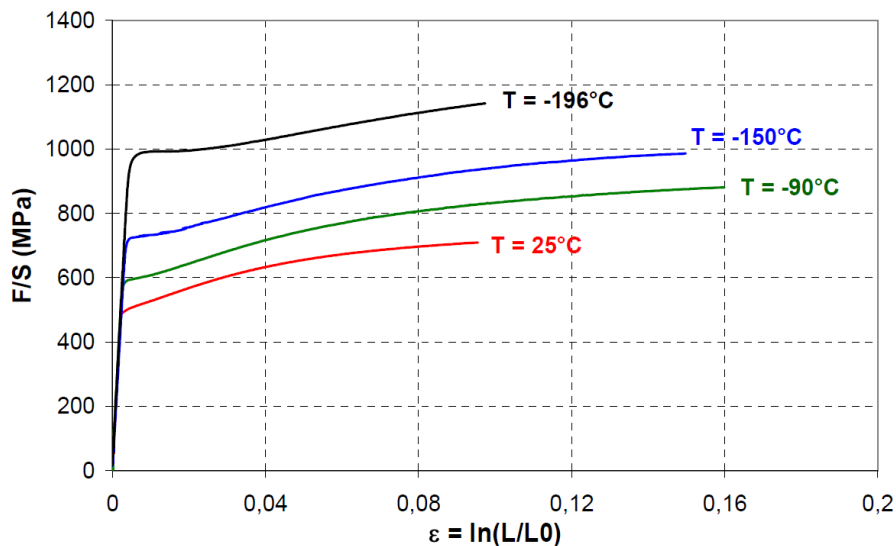


Fig. II-10 : Courbes de traction rationnelles pour l'acier 16MND5 entre 77K et 298K avec $\dot{\epsilon} = 5 \cdot 10^{-4} \text{ s}^{-1}$ (Libert, 2007)

5.2 Ténacité

A la différence des essais de traction, que l'on utilise surtout pour caractériser le comportement en service de l'alliage (avec des matériaux non endommagés et déformés à faible vitesse : $\dot{\epsilon} \approx 10^{-4} \text{ s}^{-1}$), l'étude de la ténacité de l'acier de cuve s'intéresse à sa **rupture**, et concerne donc directement son comportement en situation accidentelle. Pour l'introduire, nous ferons largement appel à des notions détaillées dans le livre de Clément Lemaignan (2003) consacré à la rupture.

D'une manière générale la rupture du matériau nécessite deux étapes :

- La germination d'une microfissure par l'effet d'amplification de contrainte créée par un empilement de dislocations autour d'une singularité (un carbure par exemple).
- La propagation catastrophique de la fissure lorsque le développement de la plasticité autour d'elle ne réussit plus à accommoder la déformation locale qu'elle induit.

On définit alors la contrainte critique de propagation catastrophique d'une microfissure (σ_c), qui s'exprime suivant le critère de Griffith comme (Curry and Knott, 1978) :

$$\sigma_c = \sqrt{\alpha \frac{E\gamma_p}{a}} \quad (2.1)$$

Avec :

- a : longueur de la microfissure
- α : facteur dépendant de la géométrie de la fissure.
- γ_p : énergie de création de surface effective du matériau.

Le but des études de ténacité est précisément de caractériser la résistance du matériau à la propagation catastrophique des fissures. Ceci nécessite l'évaluation de la contrainte locale maximale, celle en tête de fissure (σ_{loc}), pour la comparer à σ_c . D'un point de vue théorique, on utilise la **mécanique de la rupture** dans le cadre de l'élasticité linéaire pour exprimer σ_{loc} lors d'une ouverture de fissure en mode I (en écartant ses deux lèvres l'une par rapport à l'autre) :

$$\sigma_{loc} = K_I \cdot \frac{f(\theta)}{\sqrt{2\pi r}} \quad (2.2)$$

Où :

- K_I : facteur d'intensité de contrainte en mode I : $K_I = \sigma\sqrt{\pi a}$ [MPa.m^{1/2}] (2.3)
 - o σ : contrainte normale au bord de la surface.
- $f(\theta)$: fonction de l'angle θ au plan de la fissure à valeurs dans l'intervalle [-1,1].
- r : distance à la tête de fissure.

Dans l'expression (2.2), le deuxième terme présente bien une singularité lorsque $r \rightarrow 0$, mais il reste indépendant de la fissure et du matériau considérés. Par ailleurs, K_I regroupe à lui seul tout ce qui n'est pas local (la géométrie de la fissure et l'état de contrainte macroscopique), et permet de caractériser la singularité. Lorsque qu'il atteint une valeur critique (K_{IC}), la fissure dévient instable et sa propagation est catastrophique : K_{IC} quantifie donc la résistance à la fissuration ou ténacité, pourvu que l'accommodation plastique reste confinée en tête de fissure.

Pour étudier ces phénomènes d'un point de vue expérimental, on distingue **trois types d'essais** complémentaires entre eux :

- L'essai de flexion par choc sur éprouvette entaillée (« essai Charpy ») donne une mesure de l'énergie globale nécessaire à la rupture du matériau, et permet d'observer la transition ductile fragile. S'agissant d'un test d'impact avec des vitesses de déformation de l'ordre de $10^2 - 10^3$ s⁻¹, cette transition se fait à une température plus élevée que lors des essais de traction. Les éprouvettes sont de petite taille (1cm² x 5cm) et peuvent être facilement irradiées.
- Les essais de Pellini utilisent des éprouvettes un peu plus grandes (1.6 x 5.0 x 1.22 cm), avec une fissure préexistante sur une zone soudée. Ils mesurent la température nécessaire pour arrêter sa propagation dans la largeur de l'éprouvette lors de la flexion par un grand poids (« *Nil Ductility Transition temperature drop weight* » : NDT).
- Les essais de ténacité avec des éprouvettes de grande taille (jusqu'à plus de 50 cm) dites « CT » (*Compact Tension*), mesurent directement la valeur de K_{IC} , caractéristique de la résistance à la fracture du matériau. De par la taille imposante des éprouvettes (croissante avec la magnitude du K_{IC} que l'on veut mesurer), ils ne se prêtent pas à l'irradiation en réacteur.

La Fig. II-11 montre les différents types d'éprouvettes utilisées pour ces trois essais.

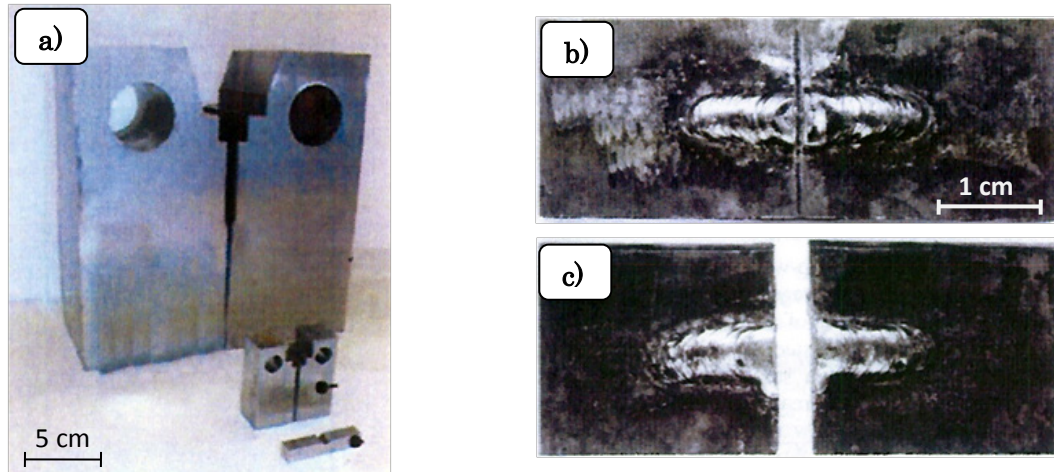


Fig. II-11 : Éprouvettes pour essais de ténacité : a) Éprouvettes CT (deux tailles différentes), et Charpy (en bas à droite) ; b) éprouvette pour essai de Pellini avec fissure arrêtée ; c) avec propagation catastrophique de la fissure.

Dans la Fig. II-12 on peut observer l'ordre de grandeur typique des résistances à l'impact lors des essais Charpy pour différentes familles d'aciers. Dans la bainite, comme dans les aciers duplex ou martensitiques, c'est la phase ferritique qui concentre la déformation plastique. Contrairement aux aciers austénitiques à matrice CFC, ceux à base de fer- α présentent une transition très marquée entre un régime fragile à basse température (où la quantité d'énergie que le matériau peut absorber avant propagation catastrophique de la fissure est très faible) et un régime plus résistant à température plus élevée (où la fissuration de l'éprouvette nécessite un grand apport énergétique). Les faciès de rupture correspondant sont alors très différents :

- On observe un clivage à basse température selon les plans $\{100\}$, là où le nombre de liaisons atomiques à rompre pour séparer deux surfaces est le plus faible (Tetelman and McEvily, 1967, Renevey, 1997).
- On observe une déchirure ductile à haute température.

La transition entre ces deux modes se fait de manière progressive, et la température de transition ductile fragile (TTDF) et souvent définie comme celle pour laquelle on obtient un faciès 50% ductile et 50% clivage.

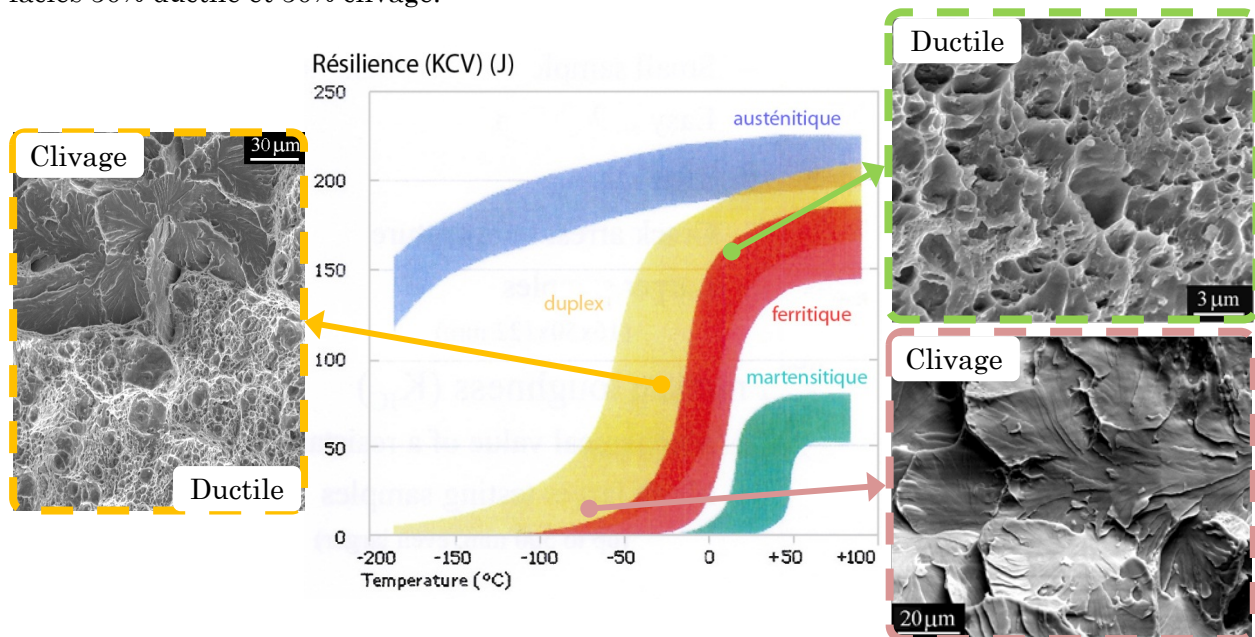


Fig. II-12 : Transition ductile fragile observé lors des essais Charpy pour différentes familles d'aciers (Lemaignan, 2004), et illustration des faciès de rupture par déchirure ductile et clivage dans l'acier 16MND5 (Hausild, 2002).

Les valeurs de K_{IC} mesurées lors des essais avec éprouvettes CT pour la bainite, de même que l'énergie absorbée lors des essais Charpy, augmentent avec la température [Fig. II-13]. Toujours sur la même figure, on peut voir aussi une certaine dispersion des essais de ténacité. Cette dispersion, intrinsèque à la compétition entre la nucléation de fissures et la déformation plastique, augmente aussi avec la température. Elle est représentée sur la Fig. II-13 par les courbes "fractiles". La courbe "fractile 5%" basse correspond à une probabilité de clivage de 5% tandis que la courbe haute correspond à une probabilité de clivage de 95%. Le même raisonnement s'applique pour la courbe "fractile 1%".

Ces courbes enveloppes de probabilité de clivage peuvent être modélisées par une méthode de type **approche locale** (Renevey, 1997, Carassou, 1999, Pineau, 2006). Cette méthode propose une approche statistique de la rupture fragile dans un volume macroscopique divisé en volumes élémentaires représentatifs. La description d'une probabilité de rupture de chacun de ces volumes élémentaires permet d'évaluer la probabilité du volume macroscopique en fonction notamment de K_{IC} .

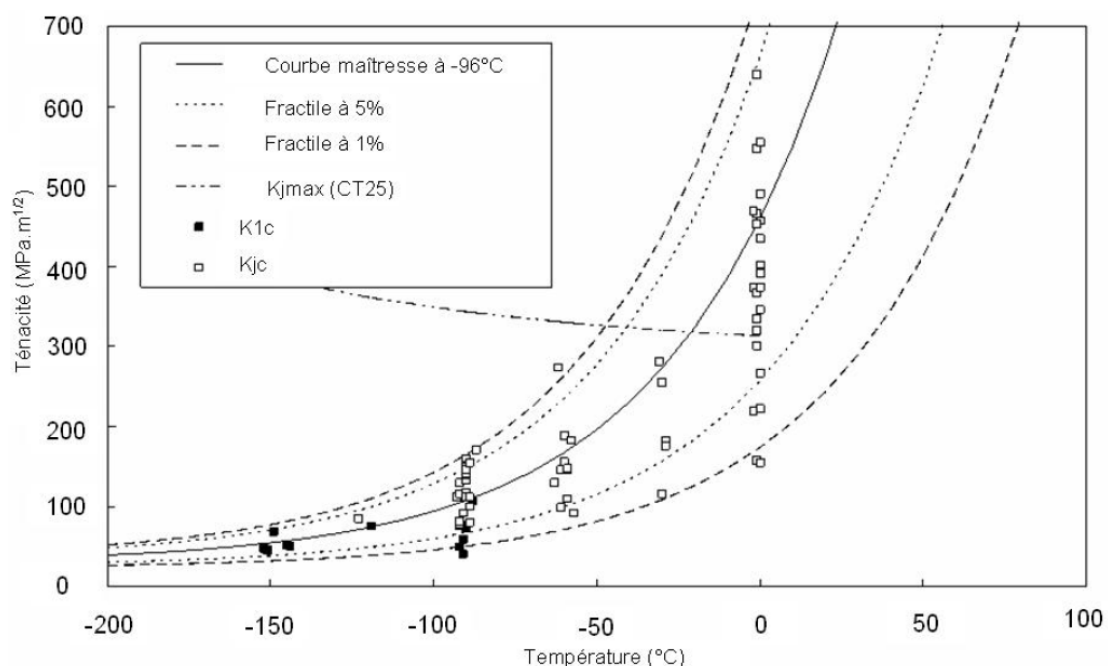


Fig. II-13 : Évolution du K_{IC} en fonction de la température d'un acier bainitique de cuve REP : « courbe maîtresse »

Signalons finalement qu'en ce qui concerne la durée de vie des cuves de REP c'est le décalage de la TTDF induit par l'irradiation qui nous intéresse. A ce propos, une étude bibliographique détaillée de la nature de l'endommagement du matériau à l'échelle micrométrique (voir nanométrique), son influence sur la plasticité au niveau microscopique, ainsi que sur les propriétés mécaniques macroscopiques, est présentée en Annexe A.

6 Conclusion

Dans ce chapitre d'introduction bibliographique à l'acier de cuve 16MND5 nous avons d'abord revu sa composition et caractéristiques de base [§2], ainsi que son élaboration [§3] et la **microstructure de bainite revenue** [§4] qui en résulte. Ainsi, le passage du matériau réel dans ses formes multiples à un modèle en dynamique de dislocations (DD) nécessite un grand nombre de simplifications et hypothèses, qui amènent à réaliser des choix pour les simulations. Dans ce sens, jusqu'à présent tous les travaux de ce type (Chaussidon, 2007, Queyreau, 2008, Naamane, 2008) ont retenu le caractère ferritique des lattes qui composent la microstructure bainitique de cet acier.

Simuler l'acier de cuve **en DD** sera donc réduit à simuler le comportement d'une **latte de fer CC**, les particularités de l'acier étant prises en compte par les conditions aux limites, la sollicitation, et parfois des obstacles au passage des dislocations. Ainsi, parmi les études citées, Chaussidon (2007) a préféré la microstructure de bainite supérieure ou aciculaire lors de son analyse du clivage au CEA, alors que les équipes de EDF ont privilégié la configuration de bainite inférieure, en étudiant le durcissement induit par les précipités de carbures intra-latte.

En ce qui concerne le **comportement mécanique** [§5], nous avons vu comment l'acier de cuve 16MND5 présente les mêmes caractéristiques de base que d'autres alliages à base de fer CC, à savoir : une forte **augmentation de la limite d'élasticité à basse température** ($T < 300\text{K}$), et une **transition** très marquée entre un domaine **fragile** (basse température) et un autre **ductile** (haute température) lors des essais de ténacité. Bien que ces deux aspects soient liés, c'est surtout la résilience du matériau qui constitue un des critères clé pour la durée de vie de la cuve des réacteurs. On s'intéresse ainsi tout particulièrement au décalage de la température de transition ductile fragile (ΔTTD) avec **l'irradiation** à laquelle est soumise la cuve pendant les 30 à 60 ans de vie du réacteur [§A-4.2].

Comme nous l'avions présenté dans le Chapitre I, ces travaux de thèse s'intègrent au sein d'une **démarche multi-échelle** qui vise à améliorer la compréhension de la **fragilisation par l'irradiation** de l'acier de cuve. Dans ce sens, au niveau de la DD il est nécessaire de mettre en place les outils qui permettent l'étude de ce matériau, non seulement dans les conditions d'essais de traction, mais aussi dans des conditions accidentelles à très grande vitesse de déformation. Or, comme nous le verrons par la suite, **l'étude du fer CC en DD** est relativement récente, et de nombreux points de base, tant sur la physique que sur les codes de calcul, restent à résoudre avant de pouvoir mettre en place des simulations plus complexes.

7 References

- AFCEN 2007. Règles de conception et de construction des matériels mécaniques des îlots nucléaires REP (RCC-M). *Tome II - Matériaux 1ère partie*. Paris: AFNOR.
- BARRALIS, J. & MAEDER, G. 1997. *Métallurgie : élaboration, structures-propriétés, normalisation*, Paris, AFNOR / Nathan.
- BENHAMOU, C., DUNAND-ROUX, L., JOBARD, D., MASSOUD, J.-P. & POITRAULT, I. Year. Cuves des REP : Choix et évolution des matériaux et des fabrications. *In*: Évolution du choix des matériaux : Petites et grandes histoires, 25/11/2008 2008 Paris.
- BENHAMOU, C., LUU, L., REGER, M., RENAUT, P. & CHAMPIGNY, F. 2007. Improvements in the Metallurgical Quality of Large Forged Pieces : Case of EPR Nozzle Shell with Integral Flange. *Revue Générale du Nucléaire (RGN)*, 6, 72-79.
- BETHMONT, M. 1988. Évolution de la ténacité dans l'épaisseur des viroles de cuves des réacteurs à eau (1ere partie): essais de caractérisation chimique, métallurgique et mécanique sur deux viroles B des cuves Q3 et Q12. Morêt-sur-Loing: EDF.
- BOCQUET, P., BUISINE, D. & DUNAND-ROUX, L. 1994. Les facteurs métallurgiques de la ténacité de l'acier de cuve. Morêt-sur-Loing: EDF.
- BOUYNE, E. 1999. *Propagation et arrêt de fissure de clivage dans l'acier 2 1/4Cr-1Mo*. Docteur en Sciences et Génie des Matériaux Thesis (PH D), Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris.
- CADIOU, L., COMON, J., DUNANDROUX, L., VASSAL, J. M. & HOUSSIN, B. 1977. METALLURGICAL DEVELOPMENT OF THICK FORGINGS IN LOW-ALLOY STEELS FOR NUCLEAR-REACTOR TANKS. *Revue De Metallurgie-Cahiers D Informations Techniques*, 74, 459-470.
- CARASSOU, S. 1999. *Déclenchement du clivage dans un acier faiblement allié : Rôle de l'endommagement ductile localisé autour des inclusions*. Docteur en Sciences et Génie des Matériaux Thesis (PH D), Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris.
- CHAUSSIDON, J. 2007. *Etude multiéchelle de la plasticité du fer alpha à basse température*. Doctorat de l'INP Grenoble Thesis (PH D), Grenoble INP - ED "Matériaux et Génie des Procédés".
- CURRY, D. A. & KNOTT, J. F. 1978. Effects of microstructure on cleavage fracture stress in steel. *Metal Science*, 12, 511-514.
- DIAWARA, B. 2007. Master Sciences - Physique Thesis (Master), Université Louis Pasteur de Strasbourg - EDF.
- GOURGUES, A. F., FLOWER, H. M. & LINDLEY, T. C. 2000. Electron backscattering diffraction study of acicular ferrite, bainite, and martensite steel microstructures. *Materials Science and Technology*, 16, 26-40.
- HAUSILD, P. 2002. *Transition ductile-fragile dans un acier faiblement allié*. Doctorat de l'École Centrale Paris Thesis (PH D), Ecole Centrale Paris.
- LAUTRIDOU, J. C. & PINEAU, A. 1981. CRACK INITIATION AND STABLE CRACK-GROWTH RESISTANCE IN A508 STEELS IN RELATION TO INCLUSION DISTRIBUTION. *Engineering Fracture Mechanics*, 15, 55-71.
- LEMAIGNAN, C. 2003. *La rupture des matériaux*, Les Ulis, France, EDP sciences.
- LEMAIGNAN, C. 2004. *Science des matériaux pour le nucléaire*, Les Ulis, France, EDP Sciences.
- LIBERT, M. 2007. *Etudes expérimentale et numérique de l'effet des mécanismes de plasticité sur la rupture fragile par clivage dans les aciers faiblement alliés*. Doctorat de l'École Centrale de Paris Thesis (PH D), Ecole Centrale de Paris.
- MANTYLA, M., ROSSOLL, A., NEDBAL, I., PRIOUL, C. & MARINI, B. 1999. Fractographic observations of cleavage fracture initiation in a bainitic A508 steel. *Journal of Nuclear Materials*, 264, 257-262.
- MATHIEU, J.-P. 2006. *Analyse et modélisation micromécanique du comportement et de la rupture fragile de l'acier 16MND5 : Prise en compte des hétérogénéités microstructurales*. Doctorat de l'Ecole Nationale Supérieure d'Arts et Métiers Thesis (PH D), Ecole Nationale Supérieure d'Arts et Métiers.
- MILOUDI, S. 1997. *Etude du dommage d'irradiation dans les aciers de cuve des réacteurs à eau pressurisée*. Doctorat Thesis (PH D), Université Paris XI Orsay.
- NAAMANE, S. 2008. *Etude de la déformation plastique de la ferrite à basse température: simulations de dynamique des dislocations*. Doctorat de l'Université Pierre et Marie Curie Thesis (PH D), Université Pierre et Marie Curie.

- NAUDIN, C. 1999. *Modélisation de la ténacité de l'acier de cuve REP en présence de zones de ségrégation*. Doctorat de l'Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris Thesis (PH D), Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris.
- NOHAVA, J., HAUSILD, P., KARLIK, M. & BOMPARD, P. 2002. Electron backscattering diffraction analysis of secondary cleavage: cracks in a reactor pressure vessel steel. *Materials Characterization*, 49, 211-217.
- OBRTLICK, K., ROBERTSON, C. F. & MARINI, B. 2005. Dislocation structures in 16MND5 pressure vessel steel strained in uniaxial tension. *Journal of Nuclear Materials*, 342, 35-41.
- OHMORI, Y., OHTANI, H. & KUNITAKE, T. 1974. Tempering of the bainite and the bainite/martensite duplex structure in a low-carbon low-alloy steel. *Metal Science*, 8, 357-366.
- PELLI, R., NENONNEN, P. & KEMPPAINEN, M. 1983. Reactor Pressure Vessel Steels ASTM A533B and A508 cl2 : microstructural investigations. Espoo: Technical Research Centre of Finland (VTT).
- PESCI, R. 2004. *Etude micromécanique et caractérisation expérimentale du comportement et de l'endommagement de l'acier de cuve 16MND5 à basses températures*. Doctorat de l'Ecole Nationale Supérieure d'Arts et Métiers Thesis (PH D), Ecole Nationale Supérieure d'Arts et Métiers.
- PINEAU, A. 2006. Development of the local approach to fracture over the past 25 years: theory and applications. *International Journal of Fracture*, 138, 139-166.
- QUEYREAU, S. 2008. *Étude des Mécanismes d'Écrouissage Sous Irradiation de la Ferrite par Simulations de Dynamique de Dislocations*. Doctorat de l'Université Pierre et Marie Curie Thesis (PH D), Université Pierre et Marie Curie.
- RENEVEY, S. 1997. *Approches globale et locale de la rupture dans le domaine de transition fragile-ductile d'un acier faiblement allié*. Docteur en métallurgie et matériaux de l'Université Paris XI Orsay Thesis (PH D), Université Paris XI Orsay.
- ROBERTSON, C. F., OBRTLICK, K. & MARINI, B. 2007. Dislocation structures in 16MND5 pressure vessel steel strained in uniaxial tension at different temperatures from -196 degrees C up to 25 degrees C. *Journal of Nuclear Materials*, 366, 58-69.
- ROSSOLL, A. 1998. *Détermination de la ténacité d'un acier faiblement allié à partir de l'essai Charpy instrumenté*. Doctorat de l'École Centrale de Paris Thesis (PH D), Ecole Centrale Paris.
- SESTIER, K. 1998. *Evolution microstructurale et comportement mécanique à haute température de l'acier de cuve 16MND5 en situation d'accident grave*. Doctorat de l'INP Grenoble Thesis (PH D), Grenoble INP.
- SIMONET, L. 2006. *Effet des hétérogénéités sur le Pouvoir Thermoélectrique de l'acier de cuve*. Doctorat Thesis (PH D), L'Institut National des Sciences Appliquées de Lyon.
- TAHAR, M. 1998. *Applications de l'approche locale de la rupture fragile à l'acier 16MND5: Corrélation résilience-ténacité et probabilité de ducture bimodale (clivage et intergranulaire)*. Doctorat de l'Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris Thesis (PH D), Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris.
- TANGUY, B. 2001. *Modélisation de l'essai Charpy par l'approche locale de la rupture. Application au cas de l'acier 16MND5 dans le domaine de transition*. Doctorat de l'Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris Thesis (PH D), Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris.
- TETELMAN, A. S. & MCEVILY, A. J. 1967. *Fracture of structural materials*, New York ; London, Wiley.

Chapitre III : Bibliographie générale sur la mobilité des dislocations dans le fer

Table des matières

Chapitre III : Bibliographie générale sur la mobilité des dislocations dans le fer... 29

1	Introduction	31
2	Mobilité dans le régime athermique.....	32
2.1	Les mécanismes de friction par phonons.....	32
2.1.1	Force de friction due à l'anharmonicité des cristaux	32
2.1.2	Friction par excitation des degrés de liberté des dislocations en mouvement.....	35
2.1.2.1	Effet « flutter »	36
2.1.2.2	Friction radiative	37
2.1.2.3	Diffusion Raman	37
2.2	Mécanismes électroniques de friction dans les métaux	37
2.3	Dépendance avec la température et comparaison avec l'expérience pour les matériaux CFC	38
2.4	Cas du fer cubique centré	40
2.4.1	Dislocations vis.....	41
2.4.2	Dislocations coins	42
2.5	Discussion	43
3	La mobilité thermiquement activée des vis	44
3.1	Introduction au modèle de Peierls-Nabarro.....	44
3.2	Le modèle de doubles décrochements	45
3.2.1	Introduction.....	45
3.2.2	Le modèle vibrationnel de Guyot et Dorn.....	46
3.2.3	Le modèle de Hirth et Lothe	46
3.2.3.1	Vitesse d'une ligne infinie	47
3.2.3.2	Vitesse d'une ligne de longueur finie L	51
3.2.4	L'énergie d'activation thermique.....	52
3.2.4.1	Introduction	52
3.2.4.2	Approximation à forte contrainte	54
3.2.4.3	Approximation à faible contrainte	58
3.2.4.4	La transition entre les deux domaines précédents	59
3.2.4.5	Ajustement de ΔG à partir de mesures expérimentales.	61
3.3	Le modèle de « <i>locking-unlocking</i> »	66
3.3.1	Introduction.....	66
3.3.2	« <i>Unlocking</i> » ou la transformation du cœur de la dislocation vers une structure métastable	67
3.3.3	« <i>Locking</i> » ou la transformation du cœur de la dislocation vers une structure de cœur stable	68
3.3.4	Le mécanisme de « <i>Locking-unlocking</i> »	68
3.4	La transition entre les mécanismes de double décrochements et de « <i>locking-unlocking</i> »	69
3.5	Observations expérimentales	72
3.6	État de l'art en dynamique des dislocations (DD)	73
3.6.1	Introduction.....	73
3.6.2	Le terme pré-exponentiel	73
3.6.2.1	Analyse théorique	73
3.6.2.2	Implémentation dans le code	74
3.6.2.3	Discussion	74
3.6.2.4	Comparaison avec le modèle de Hirth et Lothe	76
3.6.3	L'énergie d'activation thermique.....	76
3.6.3.1	Introduction	76
3.6.3.2	Discussion	77
3.6.3.3	Comparaison avec les modèles théoriques de doubles décrochements	77
3.6.4	La dérive à haute température.....	80
4	Conclusion	81
5	Références.....	82

1 Introduction

Cette thèse fait partie d'une démarche multi-échelle dont le but est d'étudier l'influence de l'endommagement par irradiation sur la plasticité de l'acier de cuve 16MND5. On cherche à comprendre le décalage de la température de transition ductile-fragile (TTDF) de la bainite induit par l'irradiation. Cependant, du point de vue des simulations en dynamique des dislocations (DD), ce matériau est modélisé comme du fer cubique centré (CC) [], les spécificités de l'alliage étant représentées par des conditions aux limites et des sollicitations particulières (Chaussidon, 2007, Naamane, 2008).

Dans le cadre de ces travaux, nous nous sommes centrés sur la partie amont de cette démarche, i.e. la prise en compte des spécificités du fer CC dans les codes DD. Dans ce sens, nous avons tout d'abord analysé les éléments apportés lors des thèses qui ont précédé ce travail (Shigesato, 2007, Chaussidon, 2007, Queyreau, 2008, Naamane, 2008). Cela nous a permis de dégager un certain nombre de points qui n'étaient à notre avis pas encore suffisamment développés, dont l'un a attiré toute notre attention : la loi de mobilité thermiquement activée des dislocations vis. Cette loi est l'un des paramètres d'entrée importants pour tout code DD, puisqu'elle règle la vitesse à laquelle chaque segment du code se déplace en fonction de la contrainte pour une température donnée.

Ce chapitre de bibliographie générale sur la mobilité des dislocations dans le Fer CC constitue une part importante du travail de thèse et trouve donc naturellement sa place dans le mémoire. Il s'agit d'une revue détaillée des modèles de la littérature disponibles à ce jour. Un objectif de cette partie est de fournir au lecteur intéressé une revue quasi-exhaustive qui facilitera les travaux à venir sur le sujet. Inversement, ce chapitre n'est pas nécessaire à la compréhension des développements concrets effectués pendant la thèse. Ainsi lorsque nous présenterons dans le chapitre V la nouvelle loi de mobilité implémentée dans le code de DD, les grandes lignes des modèles seront toujours rappelées. Il est par conséquent tout à fait possible de passer directement au chapitre IV sans rien perdre du fil général de la discussion.

Jusqu'à ce jour, la mobilité des dislocations pour la DD a été étudiée dans deux régimes bien distincts : aux faibles températures (régime thermiquement activé) et aux fortes températures (régime athermique). Dans le premier cas ($T < 300\text{K}$), on prend en compte les effets de l'activation thermique sur les dislocations vis, avec une loi différente de l'expression visqueuse utilisée pour les dislocations coin (Tang *et al.*, 1998, Shigesato, 2007, Chaussidon, 2007, Naamane, 2008). Dans le régime athermique ($T > 300\text{K}$), on retrouve des modèles similaires à ceux utilisés pour les matériaux cubiques à faces centrées (CFC), avec une loi visqueuse tant pour les dislocations coins que pour les dislocations vis (Queyreau, 2008).

Pour cette étude, la température d'intérêt se trouve à proximité de la TTDF, et donc dans le domaine de transition entre les régimes thermique et athermique, d'où l'intérêt de disposer d'une loi capable de les relier. Par ailleurs, il convient de noter que l'on utilisera toujours les termes « athermique » ou « thermique » en référence à la nature de la mobilité des dislocations, et non pas aux régimes observés lors des essais macroscopiques. En effet, même à basse température, on pourra considérer que l'on a un comportement athermique dès lors que la contrainte appliquée sur la dislocation vis est suffisamment importante.

- Pour la mobilité dans le régime athermique (dislocations vis à forte contrainte et/ou température et dislocations coins) [§2], nous suivrons essentiellement les travaux de Alshits et Indenbom (1986) sur l'étude du coefficient de friction visqueuse.
- Pour la mobilité thermiquement activée des dislocations vis [§3], étroitement liée à la fragilité à basse température de ces alliages, nous détaillerons les différents mécanismes théoriques, dont celui des doubles décrochements [§3.2] (Dorn and Rajnak, 1964, Guyot and Dorn, 1967, Hirth and Lothe, 1982) et celui de « *locking* et *unlocking* » [§3.3] (Caillard and Martin, 2003d), ainsi que les applications numériques disponibles en dynamique de dislocations [§3.6] (Chaussidon, 2007, Naamane, 2008).

2 Mobilité dans le régime athermique

La mobilité des dislocations dépend d'une compétition entre les fluctuations thermiques et des processus dynamiques, dont le poids relatif varie selon la vitesse, et donc la contrainte. Au mouvement des dislocations dans un cristal s'opposent différentes barrières, qui peuvent être liées soit à la structure périodique du cristal (vallées de Peierls), soit à des défauts du réseau. A faible contrainte (vitesse), les dislocations s'arrêtent sur ces barrières, qu'elles peuvent surmonter à l'aide des fluctuations thermiques. A forte contrainte (vitesse) ces obstacles peuvent être surmontés mécaniquement, et la vitesse des dislocations est alors contrôlée par les transferts d'énergie de la dislocation vers les différentes modes d'excitations du cristal.

Dans cette section on s'intéresse donc au domaine des fortes contraintes, tandis que la section suivante traite le régime thermiquement activé. Nous reprenons ici l'analyse effectuée par Alshits et Indenbom (1986) (noté A & I par la suite).

Ce régime, dit « dynamique », commence à partir de vitesses de l'ordre de $10^{-2} c$ pour les matériaux CFC et plus tard pour les CC dont les barrières de Peierls sont plus élevées (c : vitesse des ondes transverses dans le matériau, $\approx 3000\text{m/s}$ dans le fer CC). Il se caractérise par une relation linéaire entre la vitesse des dislocations et la contrainte appliquée, i.e. un mouvement visqueux. On écrit alors la vitesse d'une ligne de dislocation comme :

$$v = \frac{\tau b}{B} \quad (3.1)$$

avec :

- τ : cission résolue appliquée sur la dislocation
- b : module du vecteur de Burgers
- B : coefficient de frottement visqueux

Dans ce régime dynamique, un taux d'impuretés croissant ou une augmentation de la température se traduisent par un frottement plus intense, i.e. une augmentation de B .

Dans cette section, nous revoyons les mécanismes physiques à l'origine de cette friction [§2.1 et §2.2], ainsi que leur importance relative selon le domaine de contrainte-température considéré [§2.3]. Nous analysons ensuite le cas particulier du fer CC [§2.4], en comparant les résultats théoriques aux mesures expérimentales. Dans la suite de ce chapitre [§3] nous aborderons le régime thermiquement activé, ainsi que la transition vers le régime athermique ici décrit, que nous considérons comme point de départ de ces travaux de thèse.

2.1 Les mécanismes de friction par phonons

De manière générale, on distingue deux mécanismes de friction, l'un dû à l'anharmonicité des cristaux, et le deuxième à l'excitation des degrés de liberté des dislocations elles-mêmes, que nous détaillons respectivement dans les paragraphes §2.1.1 et §2.1.2.

2.1.1 Force de friction due à l'anharmonicité des cristaux

Suivant l'analyse de A&I (1986), on considère que le champ élastique d'une dislocation qui avance uniformément dans le cristal perturbe l'équilibre du gaz de phonons. Pour des vitesses (v) non relativistes, ce champ de déformation peut s'écrire dans l'approximation quasi-statique comme un paquet d'ondes planes :

$$\varepsilon_{ij}(\mathbf{r}, t) = \sum_q \varepsilon_{ij}^q \exp[i\mathbf{q}\mathbf{r} - \Omega_q t] \quad (3.2)$$

avec :

- ε_{ij}^q : transformée de Fourier du champ de déformation statique
- $\Omega_q = \mathbf{q}v$: fréquence de l'onde de vecteur d'onde $\mathbf{q}$, perpendiculaire à la ligne.

De par l'anharmonicité du cristal, le paquet d'ondes (3.2) va interagir avec les phonons. Ceci donne lieu à une dissipation d'énergie D par unité de temps et de ligne, que l'on peut relier au coefficient de frottement visqueux ($B = D/\nu^2$). Par ailleurs, D peut s'approximer au premier ordre par la somme des atténuations respectives de chaque onde du paquet :

$$D = \sum_{\mathbf{q}} \Omega_q^2 \eta_{ijkl}(\mathbf{q}, \Omega_q) \varepsilon_{ij}^q \varepsilon_{kl}^{-q} \quad [\text{J.m}^{-1}\text{s}^{-1}] \quad (3.3)$$

Où $\eta_{ijkl}(\mathbf{q}, \Omega_q)$ est la viscosité effective pour l'onde de vecteur d'onde $\mathbf{q}$ et de fréquence Ω_q .

En effet, les différents processus dissipatifs dans le sous-système des phonons à l'origine de cette viscosité, dépendent aussi bien de la fréquence (Ω_q) que de la longueur d'onde ($\lambda = 2\pi/q$) de la perturbation. De manière générale, A & I distinguent 3 domaines dans l'espace $\{\Omega_q, \mathbf{q}\}$ en fonction des valeurs relatives de Ω_q et $\mathbf{q}$ par rapport au temps de relaxation des phonons (τ), et à son libre parcours moyen (l) [Fig. III-1] :

- I ($\Omega_q < \tau^{-1}, q < l$) : les processus macroscopiques de relaxation prédominent.
- II ($\Omega_q > \tau^{-1}, q < l$) : les processus quantiques de diffusion des phonons prédominent.
- III ($\Omega_q > \tau^{-1}, q > l$) : la dissipation résulte d'une combinaison des deux précédents.

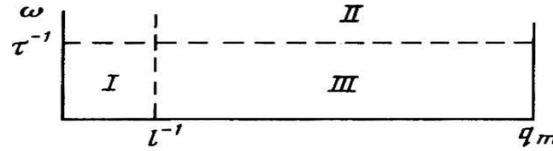


Fig. III-1 : Diagramme de phase (Alshits and Indenbom, 1986) montrant la différence de l'atténuation d'une onde élastique qui interagit avec le sous-système de phonons d'un cristal, en fonction de la région du plan $\{\Omega_q, q\}$ dans laquelle se trouvent son vecteur d'onde et sa fréquence : (I) Région dans laquelle les processus de relaxation macroscopiques tels que la viscosité des phonons ou les pertes thermoélastiques prédominent ; (II) Région quantique où la diffusion des phonons par le champ élastique de l'onde joue le rôle principal ; (III) Région cinétique où on a une compétition entre les processus de diffusion et relaxation.

Les fréquences des modes de vibration possibles dans un réseau cristallin (~phonons) dépendent de sa structure. Une première distinction motivée par des comportements physiques fondamentalement différents est alors faite entre des phonons « suboptiques » (modes à relativement basse fréquence présents dans tous les réseaux cristallins) et ceux « optiques » (modes à très haute fréquence présents dans les réseaux avec plus d'un atome par unité de maille tels que les CC). L'influence des mécanismes de relaxation et diffusion liés à ces derniers est jugée très faible dans la plupart des cas d'intérêt, et nous ne la détaillons pas ici.

En ce qui concerne les phonons suboptiques, A&I retiennent trois mécanismes ayant un impact dominant sur le coefficient B dû aux phonons (B_{ph}) dans chacun des domaines définis en $\{\Omega_q, \mathbf{q}\}$:

- Les pertes thermo-élastiques (I, relaxation). Au passage d'une dislocation des parties du cristal subissent des compressions/dilatations rapides qui conduisent à un échauffement / refroidissement différentiel. Il s'instaure ainsi un flux de phonons ou de chaleur des parties chaudes vers les froides, qui conduit à une dissipation thermo-élastique.
- Le vent de phonons (II, diffusion). Si l'on considère un repère centré sur la dislocation en mouvement, le flux de phonons incident devient asymétrique. Les phonons diffusés par la dislocation lui transfèrent une quantité de mouvement nette proportionnelle à sa vitesse et opposée à son mouvement. Tout se passe donc comme si la dislocation faisait face à un « vent de phonons » qui la freine.
- La relaxation du gaz de phonons « lents » après avoir été excités par le passage de la dislocation (III, relaxation-diffusion).

En prenant en compte ces trois mécanismes, A&I aboutissent à l'expression de B_{ph} , suivante :

$$B_{ph} \approx \frac{(\alpha_{anh}b)^2}{64\pi} \left\{ \frac{CT}{\chi} \ln\left(\frac{c}{v}\right)^s + \frac{1}{\pi} \hbar k_D^5 \left[f_1\left(\frac{T}{\theta}\right) + \lambda_s f_2\left(\frac{T}{\theta_s}\right) \right] \right\} [\text{Pa.s}] \quad (3.4)$$

Où :

- C : chaleur spécifique volumique [$\text{J.m}^{-3}.\text{K}^{-1}$]
- χ : diffusivité thermique ; $\chi \approx c\ell/3$ [$\text{m}^2.\text{s}^{-1}$]
- k_D : nombre d'onde le plus élevé dans le spectre de phonons de Debye [m^{-1}].
- α_{anh} : coefficient proportionnel au niveau d'anharmonicité du cristal considéré.
- θ : température de Debye
- θ_s : température caractéristique des phonons lents ($\theta_s \approx \theta$)
- s : coefficient de l'ordre de l'unité [= 0 pour les vis, $\neq 0$ pour les coins à partir de températures « pas trop petites » (Alshits and Malshuko.Ag, 1972)].

Les paramètres λ_s, f_1 , et f_2 ont pour expressions :

- $\lambda_s \approx \frac{10g_s}{\beta_0^2} k_D \ell \propto \frac{\theta}{T}$
- $\beta_0 = 2k_D r_0 \approx 30$ pour des valeurs typiques de k_D et r_0 .
- $f_1(x) = x^5 \int_0^{1/x} \frac{t^5 e^t}{(e^t - 1)^2} \frac{\text{arctg } \beta_0 x t}{\beta_0 x t} dt \stackrel{T \nearrow}{\approx} \begin{cases} x/4, & \beta_0 \ll 1 \\ x/2\beta_0, & \beta_0 \gg 1 \end{cases}$
- $f_2(x) = \frac{x^{-1} \exp x^{-1}}{(\exp x^{-1} - 1)^2}$

Où :

- g_s : fraction du volume de la zone de Brillouin occupée par les phonons lents.
- r_0 : rayon du cœur de la dislocation, estimée à $r_0 \approx 3b$ (Lothe, 1962).

Dans (3.4), le premier terme correspond aux pertes thermo-élastiques (domaine I), le deuxième au vent de phonons (domaine II), et le troisième à la relaxation des phonons lents (domaine III). L'analyse numérique révèle qu'en générale le premier terme est relativement faible devant les deux autres, ce qui permet de simplifier l'expression de $B_{ph}(T)$ sous la forme :

$$B_{ph}(T) = \left| \frac{M}{\mu} \right|^2 \frac{\hbar}{b^3} \left(\frac{k_D b}{2\pi} \right)^5 \left[f_1\left(\frac{T}{\theta}\right) + \lambda_\theta \frac{\theta}{T} f_2\left(\frac{T}{\theta_s}\right) \right] \quad (3.5)$$

Où :

- $\lambda_s = \lambda_\theta (\theta/T)$, λ_θ étant la valeur de λ_s à $T = \theta$.
- $\alpha_{anh} \approx \left| \frac{M}{4\mu} \right|$, avec M : valeur caractéristique du module de troisième ordre.

Notons que dans (3.5) nous avons explicité la dépendance en température du paramètre λ_s , que l'on écrit comme un produit d'une constante λ_θ et du facteur θ/T . Dans la pratique, la complexité du spectre de phonons rend impossible le calcul analytique de λ_θ , qui est alors choisi phénoménologiquement.

Par ailleurs, pour les dislocations vis, le rapport M/μ peut être approximé à partir de l'approximation isotropique de Murnaghan comme (Alshits, 1970) :

$$\left| \frac{M}{\mu} \right|^2 \approx 4 + \left(\frac{n}{\mu} + 6 \right)^2 \quad (3.6)$$

Où n est le module de Murnaghan, dont le Tableau III-1 montre les valeurs pour le Cu et le Fe (Seeger and Buck, 1960), mais ne sont pas connus pour la majorité des matériaux.

	n [GPa]	μ [GPa]	n/μ
Cu	1560 ± 20	81,00	33,3
Fe	1490 ± 10	46,77	18,4

Tableau III-1 : Valeurs du coefficient de Murnaghan « n » pour le Cu et le Fe (Seeger and Buck, 1960).

Nous verrons dans la partie §2.3 comment l'expression (3.5) permet de rendre compte de l'évolution de B avec la température dans des matériaux CFC tels que le Cuivre. Cependant, cela est loin d'être le cas pour les matériaux tels que le fer CC, pour lequel il faut également analyser la friction dérivée de l'excitation des degrés de liberté des dislocations en mouvement, que nous présentons par la suite.

2.1.2 Friction par excitation des degrés de liberté des dislocations en mouvement

Dans la partie précédente nous avons considéré que la dislocation avance uniformément comme une entité linéaire parfaite. Pour expliquer certains mécanismes dissipatifs, il faut cependant considérer ses degrés de liberté internes. En effet, la stabilité de la ligne est affectée par des fluctuations thermiques et dynamiques, et sa vitesse n'est jamais uniforme à une échelle suffisamment fine.

On distingue alors 3 sources de friction additionnelles, que l'on détaillera successivement dans ce paragraphe : l'effet *flutter*, la friction radiative et la diffusion Raman.

L'effet « *flutter* », correspond à l'émission de phonons par les perturbations (oscillations) de la linéarité de la dislocation et l'uniformité de son mouvement dont l'origine est le champ thermique du réseau.

Les deux autres effets considèrent l'influence du relief de Peierls (potentiel périodique) sur les propriétés dynamiques des dislocations. Il ne s'agit pas de discuter de la contrainte de Peierls (τ_p), nécessaire à la mise en mouvement de la dislocation, mais de la dissipation induite par les variations de la structure de cœur (oscillations configurationnelles) et de la vitesse (oscillations dynamiques) ressenties par la dislocation qui se déplace à travers ce potentiel. Ces changements périodiques conduisent à deux autres types de friction :

- la friction radiative, ou émission d'ondes par les oscillations périodiques du champ élastique de la dislocation lors du mouvement à travers les vallées de Peierls.
- la friction par diffusion Raman de phonons par ces mêmes variations du champ élastique de la dislocation.

2.1.2.1 Effet « flutter »

L'analyse de l'effet « flutter » a fait l'objet de nombreuses études (Nabarro, 1951, Lothe, 1960, 1962, Eshelby, 1962, Brailsford, 1970, Ninomiya, 1974), qui ont permis à Alshits et Sandler (1974) de décrire le coefficient de friction associé (B_f) comme :

$$B_f = \frac{\hbar k_D^3}{2\pi^2} f_3\left(\frac{T}{\theta}\right) \quad (3.7)$$

Où $f_3(x)$ est une fonction adimensionnelle qui détermine la dépendance en T de B_f [Fig. III-2].

A haute température, de même que pour le « vent de phonons » (B_w), B_f varie linéairement avec T . Le ratio B_f/B_w tend dans ce cas vers une valeur constante et très inférieure à l'unité, l'effet flutter étant alors négligeable par rapport au vent de phonons :

$$\frac{B_f}{B_w} = d_0 \approx \left(\frac{10\mu}{M}\right)^2 \ll 1 \quad (T \geq \theta) \quad (3.8)$$

Aux températures suffisamment basses, la dépendance de B_f en T est cependant cubique, soit la plus faible décroissance des mécanismes analysés. Dans ce cas, le rapport B_f/B_w tend asymptotiquement vers :

$$\frac{B_f}{B_w} = \left(\frac{T_0}{T}\right)^2 \quad (T \ll \theta), \quad \text{avec } T_0 \approx \frac{10\mu}{M} \frac{\theta}{k_D b} \quad (3.9)$$

Dans le cas des dislocations vis dans le cuivre, où le rapport (μ/M) peut être estimé à l'aide de (3.6), Alshits et Indenbom obtiennent $T_0 \approx 15\text{K}$ et $d_0 \approx 0,1$. Le « flutter » domine donc la contribution des phonons à basse température.

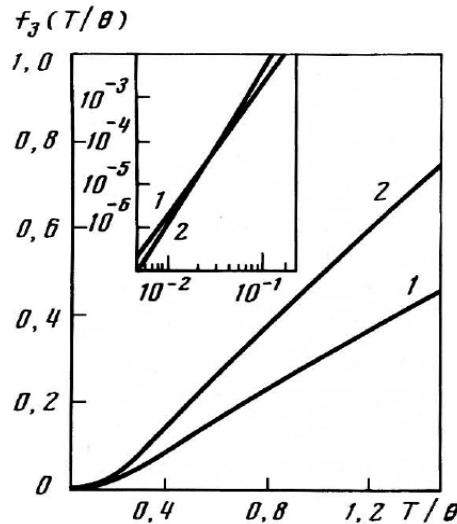


Fig. III-2 : Forme de la fonction $f_3(T/\theta)$, qui détermine la dépendance en température de l'effet « flutter », pour une dislocation vis (1) et coin (2) (Alshits and Sandler, 1974).

2.1.2.2 *Friction radiative*

On considère ici la perte d'énergie de la dislocation par radiation d'ondes élastiques en traversant les vallées de Peierls. Ayant pour origine la nature discrète du réseau, la friction radiative est donc indépendante de la température, contrairement aux autres mécanismes analysés. Cependant, de par son caractère dynamique, elle introduit une dépendance avec la vitesse de la dislocation, qui permet de différencier les deux sources possibles (oscillations configurationnelles et dynamiques) :

- la radiation induite par les changements de la structure de cœur est indépendante de la vitesse de la dislocation jusqu'aux vitesses proches de celle du son (Weiner, 1964, Atkinson and Cabrera, 1965). Elle n'est d'ailleurs quantitativement appréciable que dans ce régime de très forte vitesse ($v \sim c$) (Flytzanis and Celli, 1972).
- la radiation induite par les variations périodiques de la vitesse de la dislocation n'est importante qu'à relativement faible vitesse. A & I ont estimé l'ordre de grandeur à :

$$B_{rf} \approx \left[\frac{\tau_p b}{B_w v} \coth \frac{\tau_p b}{B_w v} - 1 \right] \cdot B_w (T = \theta) \quad (3.10)$$

L'expression (3.10) n'est valable que pour des vitesses suffisamment élevées (à vitesse nulle elle tend vers l'infini), lorsque la contrainte appliquée est suffisante pour franchir les vallées de Peierls. De fait, le phénomène sature pour une vitesse limite que l'on peut approximer par :

$$v_c \approx c \sqrt{\tau_p / \mu} \quad (3.11)$$

L'importance relative de ce mécanisme dans le B global dépend fortement de la hauteur de la barrière de Peierls, comme on le verra dans les parties §2.3 et §2.4.

Notons finalement que cette analyse a été aussi réalisée pour le cas spécifique des doubles décrochements dans les matériaux de type CC (Kosevich and Natsik, 1967).

2.1.2.3 *Diffusion Raman*

Dans le dernier cas, on prend en compte la diffusion de phonons, non pas à cause du paquet d'ondes (3.2), mais à cause des oscillations configurationnelles et dynamiques du champ élastique de la dislocation traversant les vallées de Peierls. Ces oscillations, dont la fréquence fondamentale est $\Omega_1 = 2\pi v/a$ et les harmoniques principaux sont $\Omega_n = \Omega_1 n$, diffusent les phonons de manière inélastique (Raman) en leur transférant une énergie $\Delta E_n = \pm \hbar \cdot \Omega_n$. L'expression des pertes résultantes est identique à celle du « vent de phonons » à un facteur indépendant de la température près, qui vaut :

$$I_{conf} \approx 16\pi^3 \frac{\tau_p}{\mu}, \quad I_{dyn} \approx \left[\frac{\tau_p}{\mu} \frac{c^2}{v^2} \left(\ln \frac{c}{v} \right)^{-1} \right]^2 \quad (3.12)$$

Ainsi, la contribution des oscillations configurationnelles sera importante dans les cristaux dont la contrainte de Peierls est très élevée ($\tau_p/\mu \geq 10^{-3}$), tandis que, dans le régime de vitesses considéré ($v \geq 10^{-2} c$), la contribution des oscillations dynamiques peut souvent être négligée.

2.2 Mécanismes électroniques de friction dans les métaux

Un développement similaire à celui réalisé pour le gaz de phonons peut être réalisé pour les électrons de la bande de conduction des métaux. Leur vitesse étant cependant trois ordres de grandeur supérieure à celle du son ($v_e \approx 10^6 \text{m/s}$), ils ressentent le champ élastique de chaque onde du paquet de l'équation (3.2) comme un champ statique.

Dans ce cas, et pour la majorité des métaux, l'essentiel de la friction provient du "vent d'électrons", dont l'origine est similaire au "vent de phonons", mais indépendant de la température. A & I proposent l'estimation suivante:

$$B_e \approx 10^{-1} \frac{b N_e \varepsilon_F}{v_F} \quad (3.13)$$

avec:

- N_e : densité d'électrons de conduction
- ε_F : énergie de Fermi
- v_F : vitesse de Fermi

L'application numérique de (3.13) donne $B_e \approx 10^{-6}$ Pa.s pour les métaux usuels. Cependant, le calcul quantique qui aboutit à l'expression (3.13) comporte des nombreuses approximations, et dans la réalité il existe une grande dispersion des valeurs de B_e selon le métal considéré [jusqu'à un ordre de grandeur selon Lenz et Lücke (1969)]. C'est la raison pour laquelle Kaganov *et al.* (1973) défendent sa détermination expérimentale.

Notons finalement qu'il existe des observations expérimentales montrant dans certains cas une augmentation de la friction électronique lorsqu'on se rapproche des très basses températures. Alshits et Indenbom proposent de tenir compte des "électrons lents" pour décrire ce phénomène. Pour les températures d'intérêt, la dépendance en T reste cependant faible, et la contribution électronique à la friction globale est considérée négligeable à partir d'environ 30 à 40K.

2.3 Dépendance avec la température et comparaison avec l'expérience pour les matériaux CFC

En ce qui concerne la comparaison avec l'expérience, Alshits et Indenbom se limitent aux matériaux CFC et ne considèrent pas fiables les mesures expérimentales de B à très faible température ($T \leq 10^{-1}\theta$) ni à très forte température ($T \gg \theta$). Une exception est faite pour le cuivre à basse température, où Kobelev *et al.* (1979) montrent que B tend vers une valeur constante $B(0) \approx 10^{-1} B(\theta)$, interprétée comme B_e , la composante électronique de B .

Dans la plage de températures d'intérêt pour notre étude ($\theta/10 \leq T \leq \theta$), A & I négligent la contribution électronique [§2.2] et proposent de suivre l'équation(3.5). Celle-ci permet d'obtenir les valeurs absolues de B , mais a pour inconvénient de nécessiter les valeurs expérimentales de n , qui ne sont disponibles que pour peu de matériaux. Afin d'établir une comparaison avec l'expérience aussi large que possible, ils préfèrent donc la forme adimensionnelle suivante :

$$\frac{B(T)}{B(\theta)} = \frac{f_1(T/\theta)}{f_1(1)} (1 - \Delta f_2(1)) + \Delta \frac{\theta}{T} f_2(T/\theta), \quad \lambda_\theta = \frac{f_1(1)}{1 - \Delta f_2(1)} \quad (3.14)$$

Où :

- Δ est un paramètre adimensionnel déterminé expérimentalement en extrapolant la forme asymptotique de $B(T)/B(\theta)$ jusqu'à $T = 0$ K [Fig. III-3a].
- on a fait l'approximation $\theta_s \approx \theta$.

A partir de l'expression (3.14), A&I montrent qu'on peut reproduire les mesures expérimentales de B en utilisant des valeurs de λ_θ (et donc g_s) raisonnables d'un point de vue physique [Fig. III-3]. Par ailleurs, toujours pour le cuivre, on dispose de mesures expérimentales de n [Tableau III-1] qui conduisent à des valeurs absolues de B en accord avec l'expérience (Alshits and Indenbom, 1986).

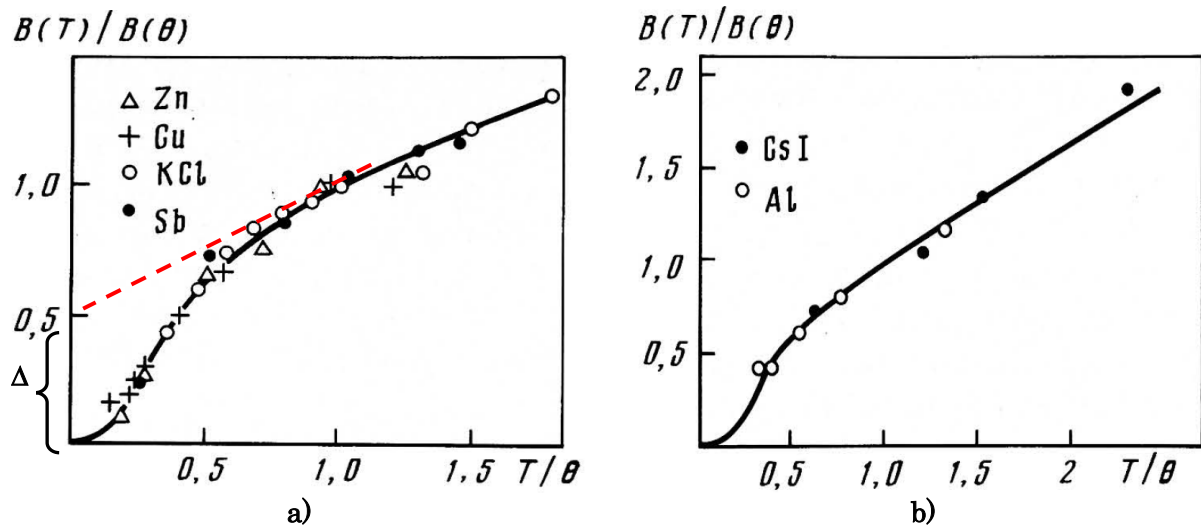


Fig. III-3 : Dépendance en température de $B(T)$: comparaisons entre les résultats théoriques (ligne continue) en utilisant (3.14) et les points expérimentaux pour : **a)** Zn et Cu (Jassby and Vreeland, 1971), KCl (Andronov *et al.*, 1975), et Sb (Pal-Val *et al.*, 1976) ; **b)** Al (Gorman *et al.*, 1969) et CsI (Darinskaya *et al.*, 1981). Les valeurs de θ et Δ utilisées dans l'application numérique sont recueillies dans le Tableau III-2. Celle de Δ est obtenue en extrapolant la forme asymptotique de $B(T)/B(\theta)$ jusqu'à $T = 0$ K (**a**).

	Zn	Cu	Sb	KCl	CsI	Al
θ	240	310	200	270	130	230
Δ	0,6	0,6	0,6	0,6	0,5	0,5

Tableau III-2 : Valeurs de Δ et θ utilisées dans (3.14) pour tracer les courbes théoriques de la Fig. III-3.

Mécanisme de friction	Dépendance en température		$B / B_w, T \approx \theta$
	$T \ll \theta$	$T \approx \theta$	
Vent de phonons	T^5	T	1
Flutter	T^3	T	$\approx 10^{-1}$
Relaxation des phonons « lents »	$\frac{\tau}{T} \exp(-\theta/T)$	cte	≈ 1
Pertes thermo-élastiques	T^4 / τ	T^2	$\approx 10^{-1}$
Viscosité des phonons	T^4 / τ	T^2	$\approx \left(\frac{v b}{c l} \right)^2 \ll 1$
Diffusion Raman	T^5	T	$\approx 10^3 \sigma_p / G$
Friction radiative			$\approx \frac{\sigma_p b}{B_w v} \coth \frac{\sigma_p b}{B_w v} - 1$
Vent d'électrons	cte	cte	$\approx (10^{-2} - 10^{-1})$
Relaxation des électrons « lents »	τ_e	τ_e	$\approx (10^{-2} - 10^{-1}) \frac{\sigma_f \ell_e}{\sigma_F r_0}$

Tableau III-3 : Hiérarchie générale des mécanismes de friction dynamique des dislocations (Alshits and Indenbom, 1986); Ordre de grandeur comparée au mécanisme du « vent de phonons » à la température de Debye (θ) et dépendance en température.

Ainsi, on peut établir que, pour les matériaux CFC (à faible contrainte de Peierls), le mécanisme dissipatif principal dans les plages de températures ($10^{-1}\theta < T < \theta$) et de vitesses ($10^{-2}c < v < c/3$) considérées est le « vent de phonons ». Dans cette logique, le Tableau III-3 compare les ordres de grandeur des différents mécanismes passés en revue avec ce dernier, ainsi que leur dépendance en température. Ce raisonnement devrait pouvoir s'appliquer aux dislocations coins des matériaux tels que le fer CC, ainsi qu'aux décrochements dans le mécanisme de doubles décrochements.

2.4 Cas du fer cubique centré

Dans cette partie, nous analysons en détail le cas du fer CC à partir du modèle A&I. Dans ce cas, le régime dynamique tel qu'énoncé précédemment se traduirait par des vitesses de dislocations entre 30 et 1000 m/s. Cependant, à la différence des matériaux CFC analysés par A & I., les valeurs de τ_p pour les dislocations vis dans le fer CC sont nettement plus élevées (de l'ordre de 1,1 GPa vs. quelques dizaines de MPa). Ainsi, la vitesse minimale doit être revue à la hausse et les contributions de la friction radiative et de la diffusion Raman ne peuvent pas être négligées.

En effet, les mécanismes liés à l'anharmonicité du cristal [eq.(3.5)] conduisent dans le fer à des coefficients de friction similaires à ceux observés dans le cuivre [Fig. III-4a], ce qui contredit les résultats expérimentaux disponibles [Fig. III-4b : dislocations glissant dans les plans (110)]. Sur ces graphiques on constate que :

- les valeurs estimées de B sont beaucoup plus élevées (plus d'un ordre de grandeur) que celles prédites par le modèle du « vent de phonons » (prédominant dans les CFC).
- le coefficient B mesuré décroît avec la température, ce qui ne saurait s'expliquer par les mécanismes décrits par A & I.
- les dislocations coins n'avancent qu'environ deux fois plus vite que les vis, l'écart étant plus important à faible température.

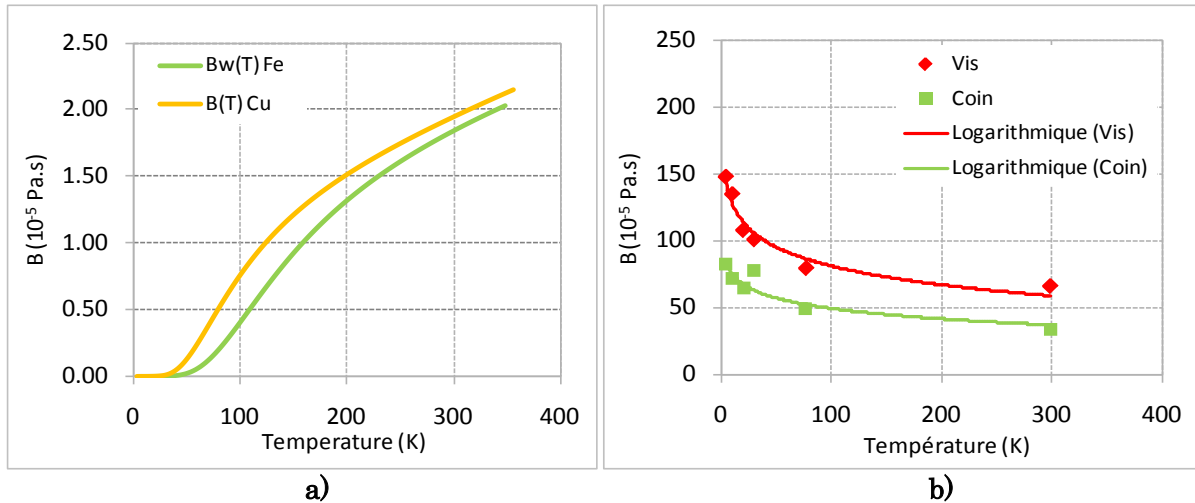


Fig. III-4 : Dépendance en température du coefficient de frottement phonons : **(a)** estimations analytiques pour le cuivre et le fer sans prendre en compte l'influence des vallées de Peierls (application numérique de l'expression (3.5) avec les approximations $r_o = 3a$ et $\beta_o=30$ dans les deux cas). **(b)** mesures expérimentales réalisées sur des monocristaux de fer « pur » (impuretés 40.6ppm, dont 1.4ppm C et 0.1ppm N) par Urabe et Weertman (1975).

Par la suite nous analysons les cas des dislocations vis et coins séparément, afin d'expliquer les données expérimentales de la Fig. III-4b dans le cadre du modèle de A & I.

2.4.1 Dislocations vis

En se rapportant aux données de la Fig. III-5, on s'aperçoit que les mesures à basse température sont très dispersées et moins nombreuses, surtout aux plus faibles contraintes, alors qu'une relation linéaire est très nettement observée à forte contrainte et haute température. Pour expliquer l'augmentation de B observée aux températures plus faibles sur la Fig. III-4b, on peut penser que les mesures aux basses températures ne relèvent pas entièrement du régime dynamique, mais sont influencées par l'activation thermique liée à des mécanismes tels que la nucléation et la propagation de double décrochements, mais aussi au franchissement d'impuretés présentes dans le cristal. On pourrait ainsi expliquer ces mesures par la compétition d'effets thermiques et dynamiques et conclure que le frottement purement visqueux n'est observable qu'à température ambiante, soit 66.10^{-5} Pa.s pour les dislocations vis.

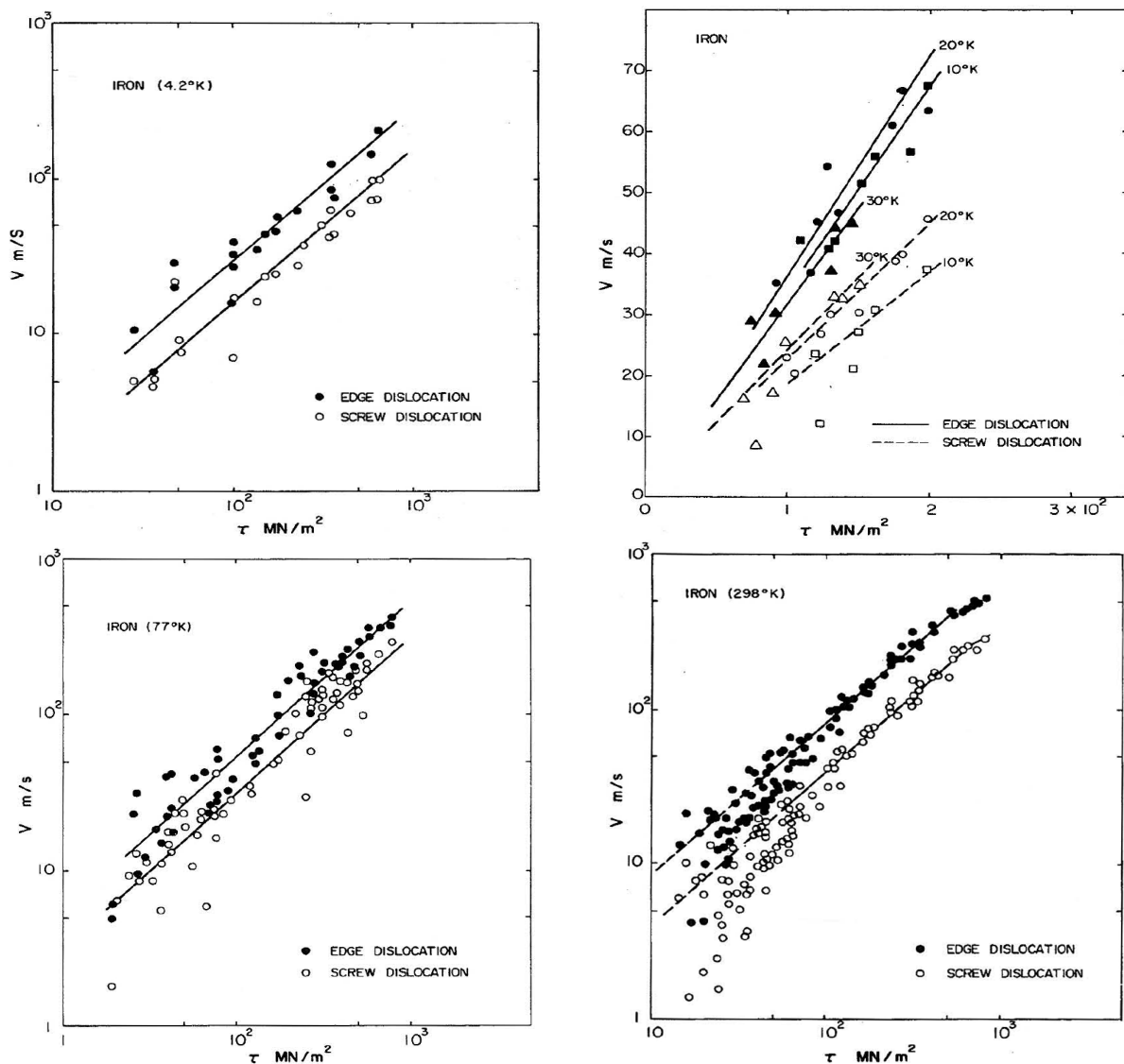


Fig. III-5 : Mesures expérimentales de la vitesse des dislocations vis et coin en fonction de la contrainte appliquée dans des monocristaux de fer « pur » (impuretés 40.6ppm, dont seuls 1.4ppm C et 0.1ppm N sont précisées), entre 4K et 298K (Urabe and Weertman, 1975). Ces mesures sont obtenues par la méthode dite « d'impulsions de contrainte », en regardant la position des dislocations dans leur plan de glissement avant et après chaque impulsion.

Le Tableau III-4 montre la contribution à température ambiante des différents mécanismes théoriques pour deux possibilités du paramètre $\beta_0 = 2r_0k_D$:

- Dans le premier cas nous utilisons le rayon du cœur de la dislocation vis (r_0) obtenu *ab initio* par Clouet *et al.* (2009) et la valeur théorique de k_D dans le modèle de Debye (Hewat, 1972).
- Dans le second, nous utilisons les approximations de A&I, soit : $\beta_0 = 30$ et $r_0 = 3a$.

On constate que, même si le poids relatif de chaque mécanisme varie entre les deux cas, la somme théorique est toujours très proche des valeurs mesurées par Urabe et Weertman (1975).

Paramètres			Prédiction théorique de B_{vis} (298K) [10^{-5} Pa.s]				Mesures exp.	
r_0	k_D	β_0	Anarmon. Eq. (3.5)	Friction radiative	Diffusion Raman	Total	vis	coin
8,6 Å	1,74 Å ⁻¹	30	2,0	29,7	20,0 (13 - 27)	51,7 (45 - 59)	66,1	34,0
3 Å	1,71 Å ⁻¹	10	4,9	11,4	49,9 (33 - 66)	66,2 (49 - 83)		

Tableau III-4 : Comparaison des prédictions théoriques du coefficient de frottement visqueux B_{vis} dans le fer à température ambiante avec les mesures expérimentales de Urabe et Weertman (1975). Les calculs utilisent les expressions du Tableau III-3, avec la vitesse limite de l'expression (3.11) pour le fer, soit 373 m/s. Pour la diffusion Raman nous considérons le milieu entre les deux extrêmes donnés par la formule (3.12) et le Tableau III-3 (entre parenthèses). L'ensemble des grandeurs physiques et paramètres utilisés sont expliquées en Annexe F.

2.4.2 Dislocations coins

En ce qui concerne les valeurs très importantes de B pour les dislocations coins glissant sur le plan (110) [Fig. III-4b], nous ne disposons pas d'explication convaincante. Pour atteindre cette friction par les mécanismes exposés dans cette section [§2.1 et §2.2], il faudrait qu'elles traversent une vallée de Peierls dont τ_p est de l'ordre de 500-600 MPa, alors que les calculs en dynamique moléculaire (MD) prédisent τ_p entre 25 et 90 MPa et des valeurs de B entre 3 et 6,7. 10^{-5} Pa.s selon le potentiel utilisé (Terentyev *et al.*, 2008a). Voici quelques origines possibles de la forte friction observée :

- les dislocations concernées (surtout à haute température) ne sont pas des dislocations coins pures. A titre d'exemple, les calculs en MD de Terentyev *et al.* (2008a) ont montré que dans le cas des dislocations mixtes à 70°, la contrainte de Peierls est supérieure à 400 MPa.
- la détermination des plans de glissement pourrait être erronée, les dislocations ne glissant pas sur le plan (110) mais (112), pour lesquelles Monnet et Terentyev (2009) ont obtenu τ_p de l'ordre de 600-700 MPa. Ceci vient cependant à l'encontre des nombreuses observations réalisées lors de différents travaux sur le fer.
- il existe une friction importante due aux impuretés contenues dans les échantillons.

Parmi ces trois possibilités, la dernière nous semble cependant la plus plausible, d'autant plus que les monocristaux utilisés par Urabe et Weertman présentent un taux d'impuretés relativement élevé (40,6 ppm).

Finalement, notons que le modèle théorique présenté ci-dessus [§2.1 à §2.3] parvient à reproduire de manière raisonnable les différences de mobilité calculées par Terentyev *et al.* (2008a) en utilisant les potentiels d'Ackland 97 et 04 (Ackland *et al.*, 1997, 2004).

La Fig. III-6 compare l'évolution théorique de la vitesse des dislocations avec la température pour une contrainte appliquée constante de 50 MPa avec les résultats de MD. Les deux courbes théoriques ont été obtenues de la même manière que le coefficient B_{vis} du Tableau III-4, et ne se différencient entre elles que par :

- la valeur de τ_p : 25 MPa pour A97 et 90 MPa pour A04.
- la vitesse choisie dans le calcul de B_{τ_f} : laissée libre dans A97, et fixée à 215m/s dans A04. Ce choix se justifie par le fait qu'à basse température les dislocations sont encore loin du régime dynamique ($\tau = 50\text{MPa} < \tau_p = 90\text{MPa}$), et il faut donc tenir compte de ce frein supplémentaire sans lequel les vitesses en dessous de 100-150K seraient beaucoup trop élevées. Le chiffre 215m/s correspond à la vitesse moyenne des données MD.

Nous constatons ainsi que la plus rapide décroissance de la vitesse avec la température dans A97 pourrait s'expliquer par une importance moindre du mécanisme athermique de la friction radiative.

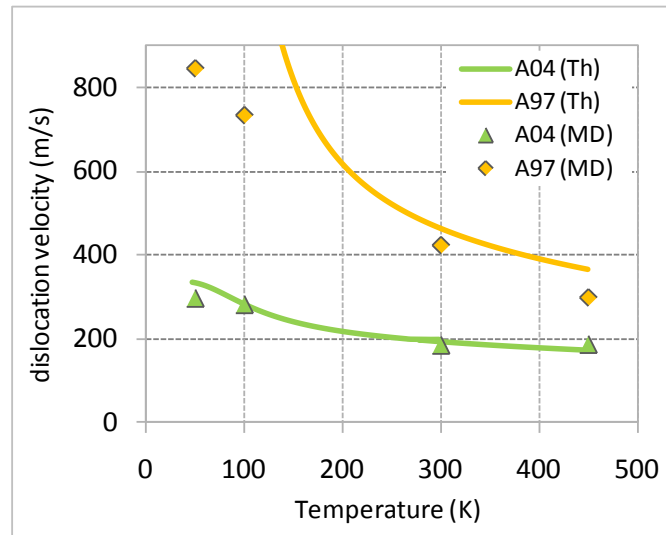


Fig. III-6 : Comparaison entre l'évolution théorique de la vitesse des dislocations coin dans le fer avec la température et les résultats obtenus en MD par Terentyev *et al.* (2008a) pour une contrainte appliquée de 50MPa. Dans le modèle théorique, les deux potentiels EAM utilisés par Terentyev *et al.* se différencient par leur contrainte de Peierls, 25MPa pour l'A97 et 90MPa pour l'A04. L'ensemble des grandeurs physiques et paramètres utilisés sont expliqués en Annexe F.

2.5 Discussion

Nous avons revu ici les différents mécanismes à l'origine de la friction visqueuse qui freine l'avancée des dislocations dans les cristaux métalliques dans le régime dit dynamique.

Alors que pour les matériaux CFC les mesures de B peuvent bien s'expliquer à partir des mécanismes de phonons dus à l'anharmonicité des cristaux (notamment le « vent de phonons »), ceci n'est pas le cas du fer CC. Les résultats expérimentaux sur ce dernier sont très rares, mais les travaux d'Urabe et Weertman (1975) montrent une friction plus d'un ordre de grandeur supérieure à celle observée dans le cuivre.

- Pour les dislocations vis, cela pourrait s'expliquer à partir des mécanismes de phonons associables aux potentiels de Peierls très élevés : la diffusion Raman et la friction radiative, à partir desquels le modèle théorique réussit à reproduire les observations.
- Pour les dislocations coins, les mesures expérimentales restent trop importantes par rapport aux prédictions théoriques. Nous considérons donc que des mécanismes non pris en compte ici tels que l'influence des impuretés sont à l'origine de cette augmentation de la friction.

En ce qui concerne notre modélisation en DD, nous nous intéressons surtout à B_{coin} , spécifiant la loi de mobilité visqueuse des dislocations coin et des décrochements dans la loi des vis. Dans ce cas, et étant donné que notre matériau d'étude est un alliage complexe avec de nombreux éléments en solution solide, nous privilégions les mesures expérimentales de Urabe et Weertman (1975) à température ambiante, soit $B = 34 \cdot 10^{-5} \text{ Pa.s}$.

3 La mobilité thermiquement activée des vis

3.1 Introduction au modèle de Peierls-Nabarro

De manière générale, pour l'acier de cuve comme pour le fer- α et la plupart des matériaux métalliques CC, on retrouve un régime dit « thermique » à basse température. Comme nous l'avons vu dans le Chapitre II (§II-5.1), dans ce régime la limite d'élasticité augmente très fortement en diminuant la température. De nombreux travaux réalisés sur ce type de matériaux ont montré que seules les dislocations vis sont affectées par une force de friction très importante qui entrave leur mouvement (Hirsch, 1968, Spitzig and Keh, 1970a, Saka and Imura, 1973, Louchet, 1976, Obrtlík *et al.*, 2005, Robertson *et al.*, 2007).

Le mécanisme de base pour expliquer ce comportement particulier fut énoncé par Peierls (1940) et Nabarro (1947). Dans leur modèle, lorsqu'une dislocation glisse à travers le réseau cristallin, son énergie varie périodiquement en fonction des changements subis par son cœur : elle doit donc vaincre un potentiel périodique, dit de Peierls [Fig. III-7].

Pour établir une loi de mobilité des vis à l'échelle de la DD, une possibilité consiste à établir la structure de cœur en repos (à contrainte et température nulles), puis étudier son évolution en fonction de la contrainte et la température. Pour cela, on utilise des simulations à l'échelle atomique (MD et/ou *ab-initio*) pour prédire :

- la structure en repos,
- la hauteur (ΔE) et la pente maximale (contrainte de Peierls, τ_p) du potentiel (à $y = y_p$), comme indiqués en Fig. III-7.

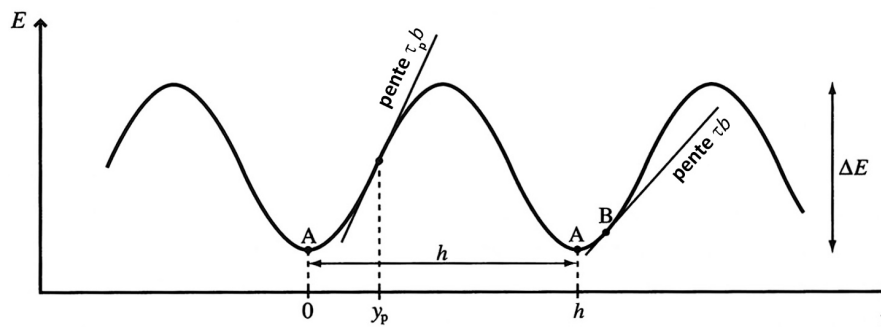


Fig. III-7 : Description schématique de la variation de l'énergie de la dislocation, E , en fonction du déplacement dans la direction du glissement, y , dans un potentiel périodique de Peierls (Caillard and Martin, 2003a).

On notera que τ_p correspond à la contrainte nécessaire pour franchir le potentiel à 0 K.

Par ailleurs, τ_p et ΔE dépendent fortement de la structure du cœur de la dislocation :

- Si elle est dissociée dans le plan de glissement, ΔE et τ_p sont faibles et peuvent être négligés. La dislocation est alors très glissile.
- Si le cœur n'est pas planaire (*i.e.* dégénéré ou compact), ΔE et τ_p sont élevés et la dislocation doit faire face à une importante « friction » du réseau pour avancer.

Ainsi, le glissement des dislocations sur des plans compacts, avec des cœurs de dislocation étalés sur le plan de glissement, est considérée facile (ex : plans octaédriques en CFC, basaux en HC). Cela est cependant loin d'être une règle générale. En effet, comme décrit par Chaussidon dans sa thèse (2007), c'est à partir d'une structure non-planaire du cœur des vis (Hirsch, 1960) que l'on peut décrire le comportement des dislocations à basse température dans les métaux CC (*i.e.* non compacts) : les vis étant freinées par un potentiel de Peierls important, leur mouvement contrôle la plasticité.

S'agissant d'un phénomène à l'échelle atomique, une partie de l'énergie nécessaire pour franchir la barrière énergétique peut être apportée par l'énergie vibrationnelle des atomes, c'est-à-dire par la température. On parle alors d'un processus « thermiquement activé », souvent représenté en utilisant l'expression d'Arrhenius pour décrire la fréquence (f) des sauts de la dislocation à travers une barrière d'énergie d'amplitude ΔG :

$$f(T, \tau) = \nu \cdot \exp\left(-\frac{\Delta G}{k_B T}\right) \quad (3.15)$$

Dans l'équation (3.15), ν représente la fréquence des tentatives de saut, tandis que l'exponentielle traduit la probabilité de succès de chacun d'entre eux, ce qui dépend à la fois de la hauteur de la barrière énergétique (ΔG) et de la température. k_B est la constante de Boltzmann. Dans ce chapitre nous analysons précisément les différents modèles développés par le passé pour estimer ces deux termes.

3.2 Le modèle de doubles décrochements

3.2.1 Introduction

Un des premiers modèles à tenir compte du potentiel de Peierls et de l'activation thermique fut celui de nucléation et propagation de doubles décrochements (noté « dd » par la suite) présenté par Seeger et Schiller (1962), et illustré ici par la Fig. III-8. C'est le modèle qui a servi de base à tout ce que nous traitons dans ce chapitre.

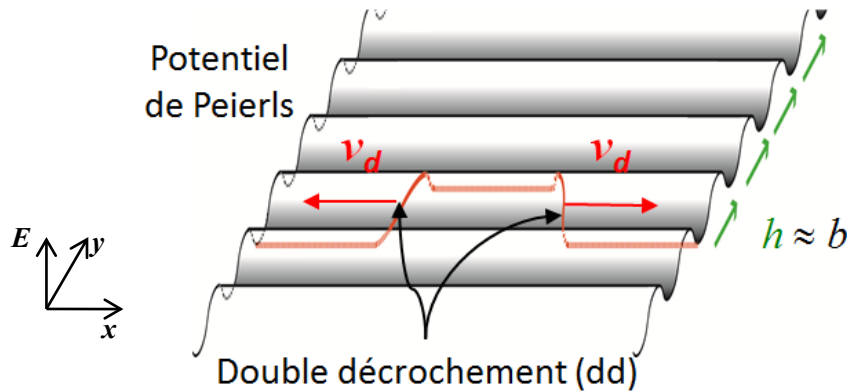


Fig. III-8 : Illustration du modèle de doubles décrochements (Seeger and Schiller, 1962) pour le mouvement des dislocations vis à travers le potentiel de Peierls dans le fer CC. La dislocation avance par nucléations et propagations successives de dd, qui se déplacent le long de la ligne à vitesse v_d .

Dans la Fig. III-8, comme dans la Fig. III-7, h représente la distance entre vallées de Peierls, soit dans le fer CC :

$$h = \frac{2\sqrt{2}}{3} b \approx b \quad (3.16)$$

Par ailleurs, v_d représente la vitesse individuelle de chaque décrochement, que l'on approxime souvent par la vitesse des dislocations coin dans le même matériau.

$$v_d \approx v_{coin} \quad (3.17)$$

Dans la discussion suivante nous décrirons d'abord les modèles théoriques qui existent pour le terme pré-exponentiel de l'équation (3.15) (Guyot and Dorn, 1967, Hirth and Lothe, 1982), puis les différentes approches théoriques (Caillard and Martin, 2003e) et expérimentales pour la détermination de ΔG . Finalement, nous analyserons l'état de l'art des expressions utilisées dans les codes de dynamique de dislocations utilisés lors de deux thèses récentes préparées au CEA et à EDF (Chaussidon, 2007, Naamane, 2008).

3.2.2 Le modèle vibrationnel de Guyot et Dorn

Le modèle développé par Guyot et Dorn (1967) (noté « G&D » par la suite), suppose que la propagation des décrochements est pratiquement instantanée par rapport au temps d'attente entre sauts ($v_{coin} \gg v_{vis}$). La mobilité des vis est alors limitée entièrement par le processus de nucléation qu'ils décrivent en faisant l'analogie d'une dislocation de longueur L avec une corde vibrante de longueur d'onde l_c . La vitesse de la dislocation vis s'écrit alors de la forme suivante :

$$v_{vis} = h \cdot v_D \frac{bL}{\Delta l_c^2} \exp\left(-\frac{\Delta G(\tau, T)}{k_B T}\right) \quad (3.18)$$

Où :

- h : distance entre vallées de Peierls (3.16).
- v_D : fréquence de vibration atomique (fréquence de Debye),
- $l_c(\tau, T)$: largeur critique d'un dd à contrainte τ et température T ,
- $v_D b / l_c$: fréquence de vibration de la dislocation de longueur d'onde l_c ,
- L / l_c : nombre de sites de nucléation de dd possibles.

De fait, cette expression correspond à l'équation (3.15) dans le cadre du mécanisme des doubles décrochements, si l'on considère que chaque saut réussi nous permet de traverser une vallée, soit :

$$v_{vis} = h \cdot f(T, \tau) \quad (3.19)$$

De même, en comparant les équations (3.15) et (3.18) on constate que la fréquence des tentatives de saut (ν) s'écrit ici comme le produit entre la fréquence de vibration de la corde et le nombre de sites de nucléation de dd possibles :

$$\nu = v_D \frac{bL}{\Delta l_c^2} \quad (3.20)$$

Comme on le verra dans la section §3.6, tous les travaux en DD dont on ait eu connaissance jusqu'à ce jour ont utilisé ce modèle avec diverses approximations.

3.2.3 Le modèle de Hirth et Lothe

Face au modèle de Guyot et Dorn décrit ci-dessus, celui développé par Hirth et Lothe (1982) (noté « H&L » par la suite) propose deux différences significatives :

- On ne considère plus forcément $v_{coin} \gg v_{vis}$, ce qui permettra de s'approcher de façon continue du régime athermique à forte contrainte.
- Au lieu du modèle de la corde vibrante, on utilise ici un modèle de diffusion pour décrire la fréquence de nucléation des dd.

Le premier point implique que l'on considère un régime de contrainte et température tel que plusieurs nucléations simultanées sont admises le long de la ligne [Fig. III-9]. Cependant, comme dans le modèle de Guyot et Dorn, on restera à l'écart des très fortes contraintes, où l'on pourrait avoir des phénomènes d'avalanches tels qu'ils ont été décrits en DM (Marian *et al.*, 2004, Chaussidon *et al.*, 2006) : le déplacement se fait une vallée de Peierls à la fois.

Dans la suite, nous présentons le modèle en supposant une ligne de dislocation infinie, puis analysons l'impact de la longueur de la ligne séparément.

3.2.3.1 Vitesse d'une ligne infinie

Dans le cas d'une ligne de dislocation infinie [Fig. III-9], on peut écrire :

$$v_{vis}^{\infty} = hX_{\infty}J \quad (3.21)$$

Où :

- $J (\sim \text{m}^{-1}\text{s}^{-1})$: est le taux de nucléation de dd (par unité de longueur de ligne et temps).
- $X_{\infty} (\sim \text{m})$: est le libre parcours moyen d'un dd avant annihilation avec un autre, croissant avec la vitesse des décrochements (v_d), et décroissant avec J (en effet, plus on a de nucléations, plus la distance parcourue par chaque décrochement sera petite).

L'expression générale de X_{∞} s'obtient à partir de celle du temps de vie moyen d'un dd (t_{dd}), que l'on peut écrire dans un régime stationnaire comme :

$$\left. \begin{aligned} X_{\infty} &= 2v_k t_{dd} \\ t_{dd} &= \frac{1}{J(X_{\infty}/2)} \end{aligned} \right\} \Rightarrow X_{\infty} = 2 \left(\frac{v_k}{J} \right)^{1/2} \quad (3.22)$$

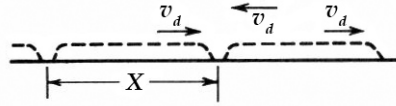


Fig. III-9 : Annihilation de dd à une séparation X_{∞} [d'après H&L Fig.15-10]

Obtention du taux de nucléation de doubles décrochements $[J]$

Comme nous l'avions avancé, pour déterminer J , H&L utilisent un modèle de diffusion dans lequel les espèces qui diffusent seraient les dd, qui diffusent dans l'espace des « longueurs des dd » (l). On peut ainsi écrire J à partir de la première Loi de Fick comme :

$$J = -D_{dd} \frac{\partial c_{dd}(l)}{\partial l} \quad (3.23)$$

Avec :

- $D_{dd} (\sim \text{m}^2\text{s}^{-1})$: coefficient de diffusion d'une paire de décrochements.
- $c_{dd}(l)dl (\sim \text{m}^{-1})$: nombre de dd de largeur entre l et $l+dl$ par unité de longueur.

Le « coefficient de diffusion des dd » $[D_{dd}]$

Le coefficient de diffusion des dd est obtenu en supposant que les deux décrochements se déplacent à la même vitesse [Fig. III-11]. On a alors $D_{dd} = 2D_d$, dans un régime type friction par phonons [cf. § 2.1], valable dans le fer dès 25 K (Seeger and Wuthrich, 1976).

En considérant la géométrie de la Fig. III-10, et en présence d'une force sur la ligne $F = \tau b h$, on déduit une expression de D_d à partir de la relation de mobilité d'Einstein (vitesse de diffusion), et celle de la vitesse d'une dislocation :

$$\left. \begin{aligned} v_d &= \frac{D_d}{k_B T} \cdot F \\ v_d &= \frac{F}{L \cdot B} \Rightarrow v_d = \frac{F}{h \cdot B} \end{aligned} \right\} D_d = \frac{k_B T}{B \cdot h} \quad (3.24)$$

Où B est le coefficient de viscosité apparente de la dislocation dans le régime de friction par phonons.

Notons ici que l'analyse de H&L prend en compte l'inclinaison du segment entre les deux vallées de Peierls, caractérisée par une largeur w , ce qui introduit en principe un facteur correcteur w/b .

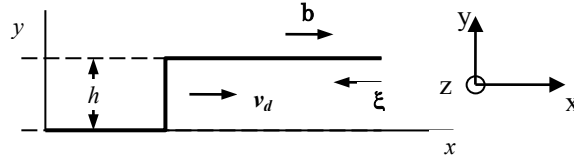


Fig. III-10 : Un décrochement se déplaçant dans le plan xy à la vitesse v_d sous l'effet d'une contrainte de cisaillement $\tau = \tau_{xz}$.

La concentration de doubles décrochements [$c_p(l)$]

La concentration se déduit à partir des concentrations d'équilibre de décrochements positifs (+) et négatifs (-) dans une ligne de dislocation en l'absence d'interaction entre décrochements ou contrainte appliquée [H&L p491].

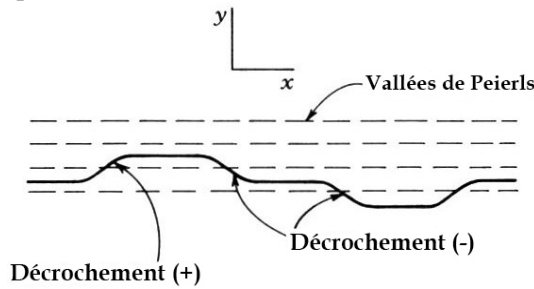


Fig. III-11 : Double décrochements le long d'une ligne de dislocation [H&L Fig.14-1].

Ainsi, en supposant une configuration comme celle de la Fig. III-11 on considère qu'on a c_d^+ décrochements(+) disponibles, et une probabilité $c_d^- dl$ de retrouver un décrochement(-) à une distance $l+dl$ d'un décrochement(+). La concentration d'équilibre de dd de largeur entre l et $l+dl$ s'écrit alors :

$$c_{dd}^0 dl = c_d^+ c_d^- dl = \frac{1}{a^2} \exp \left[-\frac{2U_d}{k_B T} \right] \quad (3.25)$$

Où :

- U_d : est l'énergie de formation d'un décrochement dans le potentiel de Peierls.
- a : est l'espacement entre sites de nucléation de décrochements le long de la ligne.

En dehors de l'équilibre, l'énergie du dd n'est plus constante, mais varie en fonction de sa largeur (l) comme $U_{dd}(\tau, l)$. On a alors :

$$c_{dd}^0(l) = \frac{1}{a^2} \exp \left[-\frac{U_{dd}(\tau, l)}{k_B T} \right] \quad (3.26)$$

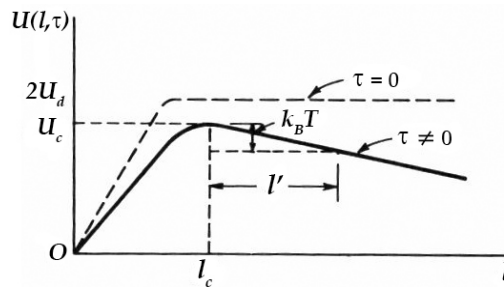


Fig. III-12 : Energie libre de formation d'un dd en fonction de la séparation entre décrochements (l) et pour différentes cissions résolues τ [d'après H&L Fig 15-6]

La valeur de $c_{dd}^0(l)$ calculée à partir des concentrations d'équilibre, elle ne tient pas compte du flux de décrochements sous l'effet de la contrainte τ . Si on considère alors une forme générique de $U_{dd}(\tau, l)$, avec un maximum $U_{dd}^{(c)}(\tau)$ pour $l = l_c$ [Fig. III-12], on peut supposer que :

- si on définit l' tel que $U_{dd}(\tau, l') = U_{dd}^{(c)} - k_B T$, alors $c_{dd}(l_c + l') \sim 0$.
- pour $l = l_c \rightarrow c_{dd}(l_c) \sim 1/2 \cdot c_{dd}^0(l_c)$ (Zeldovich, 1943, Feder *et al.*, 1966).

On peut alors approximer la dérivée de $c_{dd}(l)$ par :

$$\frac{\partial c_{dd}(l)}{\partial l} \cong \frac{c_{dd}(l_c + l') - c_{dd}(l_c)}{l'} \approx -\frac{c_{dd}^0(l_c)}{2l'} \quad (3.27)$$

Sous réserve d'établir la forme de l'énergie libre du dd $U_{dd}(\tau, l)$ et d'estimer l' , on peut donc écrire le taux de nucléation comme :

$$J = \frac{D_{dd}}{a^2 l'} \exp\left(-\frac{U_{dd}^{(c)}(\tau)}{k_B T}\right) \quad (3.28)$$

Notons ici que le terme $U_{dd}^{(c)}(\tau)$ correspond de fait à l'énergie d'activation, $\Delta G(\tau)$ [cf. eq. (3.15)], que l'on analysera dans la section §3.2.4. Dans la suite de cette section on retiendra cette notation pour faciliter sa comparaison avec les autres expressions de l'énergie d'activation.

Estimation de l_c

Les détails de ce calcul se trouvent dans la section §3.2.4.3. Nous nous limitons ici à préciser les expressions nécessaires à la détermination de l' et a (que l'on approximera par l_c), dont celle de l'énergie du dd en fonction de la largeur des dd et de la contrainte $U_{dd}(\tau, l)$:

$$U_{dd}(\tau, l) = 2U_d - \frac{\mu b^2 h^2}{8\pi l} - \tau b h l \quad (3.29)$$

On en déduit alors l_c comme la valeur de l minimisant $U_{dd}(\tau, l)$, soit :

$$l_c = \left(\frac{b h \mu}{8\pi \tau}\right)^{1/2} \quad (3.30)$$

Par ailleurs, il est important de signaler que cette analyse n'est valable qu'à contrainte relativement faible, lorsque la configuration critique des dd est telle que sa largeur critique est supérieure à celle des décrochements eux-mêmes ($l_c \gg w$) [Fig. III-13a]. Dans le cas contraire, la partie aval du dd n'atteindrait plus la vallée de Peierls suivante [Fig. III-13 (b)] et l'expression de l'énergie d'activation (3.53) ne sera plus valable. Partant de l'expression de l_c ci-dessus et de celle de w [H&L 8-38, 8-75, 8-77], cette condition se traduit par une cisssion résolue τ devant vérifier :

$$\tau < \frac{\tau_p}{2\pi} \quad (3.31)$$

Dans la pratique, ceci équivaut à avoir un ordre de grandeur entre la cisssion résolue et la contrainte de Peierls.

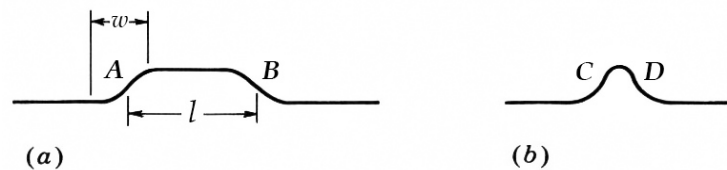


Fig. III-13 : Schéma des configurations critiques d'un double décrochement à faible (a) et forte contrainte (b)

Estimation de l'

On distingue deux cas de figure :

- Pour des ratios de τ/T élevés, lorsque la courbure de U est uniforme autour du point de col (l_c), la théorie de nucléation stationnaire permet d'approximer l' comme :

$$\left. \begin{aligned} -\frac{1}{2}l' \left| \frac{\partial^2 \Delta F(l, \tau)}{\partial l^2} \right|_{l=l_c} &= -\frac{1}{2}l' \cdot \frac{\mu b^2 h^2}{4\pi l_c^3} = k_B T \\ l_c &= \left(\frac{\mu b h}{8\pi \tau} \right)^{1/2} \end{aligned} \right\} \quad l' = \frac{k_B T}{\tau b h} \left(\frac{\tau \mu b^3 h^3}{8\pi k_B^2 T^2} \right)^{1/4} \sim \frac{T^{1/2}}{\tau^{3/4}} \quad (3.32)$$

- Pour des faibles ratios de τ/T , *i.e.* lorsque le facteur entre parenthèses de l'éq. (3.32) est inférieur à 1, la chute de $k_B T$ est essentiellement due à la contrainte appliquée. Il est alors préférable d'approximer x' directement comme :

$$\tau b h l' = k_B T \quad \Rightarrow \quad l' = \frac{k_B T}{\tau b h} \quad (3.33)$$

Si l'on suppose $a \approx l_c$, et l'on développe l'expression (3.28) pour J à l'aide des équations (3.24) pour D_{dd} , ainsi que (3.32) et (3.33) pour l' , nous obtenons finalement :

$$J(\tau, T) = \frac{v_d}{\lambda_s l_c^2} \cdot \exp\left(-\frac{\Delta G(\tau)}{k_B T}\right) \quad (3.34)$$

Dans (3.34), nous appelons λ_s « facteur correcteur de Seeger et Schiller », puisqu'il provient de l'équation (3.32) dont l'origine est la correction de Seeger et Schiller pour l'équation (3.53) :

$$\lambda_s = \left(\frac{\tau \mu b^3 h^3}{8\pi k_B T} \right)^{1/4} \sim 1 \quad \forall \tau, T / \lambda_s > 1, \quad \lambda_s = 1 \text{ autrement} \quad (3.35)$$

Finalement, il convient de souligner ici que **les expressions obtenues pour l_c , l' , et λ_s dépendent entièrement du choix de $U_{dd}(\tau, l)$** (3.29). De ce fait, elles ne seraient strictement utilisables que dans le régime de faibles contraintes établi par l'équation (3.31). Il pourrait ainsi être envisagé de pousser le raisonnement de H&L à plus fortes contraintes en partant d'une autre expression mieux adaptée pour $U_{dd}(\tau, l)$, même si nous ne l'avons pas fait nous-mêmes.

Obtention du libre parcours moyen des doubles décrochements [X_∞]

On peut maintenant développer l'équation (3.22) en utilisant (3.34) pour obtenir X_∞ comme :

$$X_\infty = 2 \left(\frac{v_d}{J} \right)^{1/2} = 2 l_c \lambda^{1/2} \exp\left(-\frac{\Delta G(\tau)}{2 k_B T}\right) \quad (3.36)$$

La loi de vitesses

Nous avons mis en place tous les ingrédients pour formuler J (3.34), X_∞ (3.36), et obtenir donc une loi de vitesses pour la dislocation vis infinie de la forme suivante [cf. eq.(3.21)]:

$$v_{vis}^\infty = h X_\infty J = v_d \frac{2}{\lambda^{1/2}} \frac{h}{l_c} \cdot \exp\left(-\frac{\Delta G}{2 k_B T}\right) \quad (3.37)$$

Où λ_s est le facteur correcteur de Seeger et Schiller de l'équation (3.35).

Comme nous venons de le voir, on doit considérer deux régimes de τ/T différents, pour lesquels λ_s a soit une dépendance en τ et T (forte τ/T), soit $\lambda_s = 1$ (faible τ/T). Nous détaillons ci-dessous la dépendance de la vitesse de la dislocation en contrainte et température qui en découle pour ces deux cas (nous prenons en première approximation $a \sim l_c \sim 1/\sqrt{\tau}$) :

- à faible τ/T :

$$v_{vis} = hX_\infty J \sim \tau^{3/2} \exp\left(-\frac{\Delta G}{2k_B T}\right) \quad (3.38)$$

- à forte τ/T :

$$v_{vis} = hX_\infty J \sim \tau^{11/8} T^{1/4} \exp\left(-\frac{\Delta G}{2k_B T}\right) \quad (3.39)$$

3.2.3.2 Vitesse d'une ligne de longueur finie L

Alors que l'analyse précédente a été réalisée pour une ligne infinie, dans le code de dynamique de dislocations nous calculons la vitesse pour des segments de longueur L . On étudie ici l'impact de la longueur finie de la ligne sur la vitesse de la dislocation. Cette analyse est d'autant plus intéressante qu'elle reste indépendante du reste du modèle.

Ainsi, pour une dislocation de longueur finie L , le libre parcours moyen (X) sera raccourci par rapport à celui de la dislocation infinie (X_∞) comme :

$$X = X_\infty \frac{L}{L + X_\infty} \quad (3.40)$$

En prenant les cas limites de ce facteur correcteur pour l'équation générale de v_{vis} (3.21) :

- pour $L \gg X_\infty$; on retrouve l'expression d'une ligne infinie (cf. eq. (3.37), puisque :

$$X = \lim_{L \gg X_\infty} \frac{X_\infty L}{X_\infty + L} \approx X_\infty \Rightarrow v_{vis} = hX_\infty J = v_d \frac{2}{\lambda^{1/2}} \frac{h}{l_c} \cdot \exp\left(-\frac{\Delta G}{2k_B T}\right) \quad (3.41)$$

- pour $L \ll X_\infty$; on obtient une dépendance en contrainte et température différente :

$$X = \lim_{X_\infty \gg L} \frac{X_\infty L}{X_\infty + L} \approx L \Rightarrow v_{vis} = hLJ = v_d \frac{1}{\lambda_s} \frac{hL}{l_c^2} \cdot \exp\left(-\frac{\Delta G}{k_B T}\right) \quad (3.42)$$

Ce point est particulièrement important, puisqu'il traduit l'effet de saturation en longueur à forte contrainte (en s'approchant du régime athermique).

En effet, X_∞ étant une fonction monotone décroissante de la contrainte, une augmentation de cette dernière conduit toujours à une situation dans laquelle $X_\infty \ll L$. Dans ce cas, la vitesse d'une vis de longueur finie est proportionnelle à X_∞ , comme dans le cas d'une ligne infinie. Par opposition à ce régime « à forte contrainte », on distinguera un régime « à faible contrainte » ($X_\infty \gg L$), dans lequel la dislocation vis avance avec une vitesse proportionnelle à sa longueur. L'expression (3.40) assure une transition continue entre les deux régimes tout en conservant la proportionnalité en L à faible contrainte du modèle de Guyot et Dorn (1967) [cf. eq. (3.18)].

3.2.4 L'énergie d'activation thermique

3.2.4.1 *Introduction*

Suite aux travaux de Peierls (1940) et Nabarro (1947), plusieurs auteurs ont traité le problème de la mobilité thermiquement activée des vis dans les matériaux CC. Une des grandeurs clés de tous ces modèles [dont celui de Guyot et Dorn (1967) et celui de Hirth et Lothe (1982)] est l'énergie d'activation, qui a fait l'objet de nombreuses études théoriques et expérimentales. Dans cette section, nous présentons la synthèse de ces travaux, en nous basant largement sur le chapitre correspondant du livre de Caillard et Martin (2003b).

Par la suite, nous analyserons donc l'énergie d'activation $\Delta G(\tau)$ dans le cadre du mécanisme de doubles décrochements, en intégrant plusieurs travaux complémentaires, ainsi que les transitions ou substitutions entre eux. Parmi ceux-ci :

- études théoriques :
 - Approximation à faible contrainte (Hirth and Lothe, 1982)
 - Approximations à forte contrainte (Dorn and Rajnak, 1964)
- études expérimentales:
 - Déterminations à partir de mesures de la variation de la limite d'élasticité avec la température et des essais de sauts de vitesse et température dans des monocristaux de fer.

Comme on le verra ci-dessous, dans ce chapitre on ne s'intéresse plus seulement à la séparation entre décrochements (notée l précédemment), mais aussi à la forme adoptée par la ligne de dislocation dans sa configuration critique. On préférera alors une notation standard dans le plan xy (direction de ligne et direction de glissement respectivement, Fig. III-8), en définissent l'espacement entre décrochements par Δx au lieu de l .

L'objectif de cette démarche est le calcul de l'énergie associée à cette configuration critique $[\Delta G(\tau)]$, soit le maximum $U_{dd}^{(c)}(\tau)$ de l'énergie de la configuration de la ligne pour une séparation et une contrainte quelconques : $U_{dd}(\tau, \Delta x)$.

Dans le cadre du mécanisme de doubles décrochements [cf. §3.2.3.1, Fig. III-13], aux fortes contraintes [$\tau > \tau_p/2\pi$, eq.(3.31)] il n'y a plus de véritable formation et séparation des dd (domaine ② de la Fig. III-14a), mais une « bosse » où la partie en aval du dd n'atteint pas la vallée de Peierls suivante (configuration ① de la Fig. III-14a).

La Fig. III-14 et le Tableau III-5 illustrent ces deux régimes où, en fonction de l'intensité de la contrainte appliquée, on aura le maximum de $U_{dd}(\tau, \Delta x)$ pour des séparations critiques entre décrochements (Δx_c) se trouvant dans trois domaines différents, le troisième n'étant qu'un cas limite du deuxième lorsque $\Delta x_c \gg h$ ($\tau \rightarrow 0$).

Ainsi, à forte contrainte [Fig. III-14b] la configuration critique est atteinte dans le régime de « bosse », où l'énergie de ligne est prédominante sur les interactions élastiques entre décrochements, et l'on utilisera l'expression de l'énergie d'activation notée $U_b^{(c)}(\tau)$.

La Fig. III-14c montre le cas à faible contrainte, où la configuration critique est celle avec deux décrochements de signe opposé qu'interagissent élastiquement indépendamment de la forme du potentiel de Peierls, et l'énergie d'activation est notée $U_{id}^{(c)}(\tau)$.

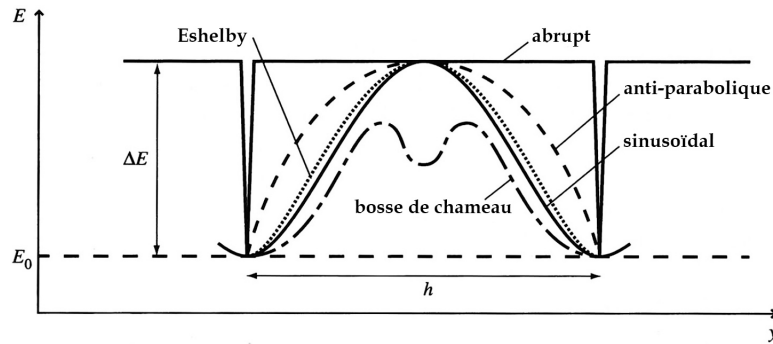


Fig. III-15 : Description schématique des différents potentiels de Peierls utilisés dans la suite (Caillard and Martin, 2003b).

	$E(y)$	τ_p	U_k (TL approx sauf pour Abrupt)
Sinusoïdal	$E_0 + \frac{\Delta E}{2} \left(1 - \cos \frac{2\pi y}{h} \right)$	$\pi \frac{\Delta E}{hb}$	$\frac{2\sqrt{2}}{\pi} h(E_0 \Delta E)^{1/2}$
Eshelby [1962] (repeated periodically)	$E_0 + 16\Delta E \left(\frac{y}{h} \right)^2 \left(1 - \frac{y}{h} \right)^2$	$3.08 \frac{\Delta E}{hb}$	$0.943 \cdot h(E_0 \Delta E)^{1/2}$
Anti-parabolique (repeated periodically)	$E_0 + 4\Delta E \frac{y}{h} \left(1 - \frac{y}{h} \right)$	$4 \frac{\Delta E}{hb}$	$\frac{\pi}{2\sqrt{2}} h(E_0 \Delta E)^{1/2}$
Pot. Abrupt	Cte sauf dans les vallées très prononcées, résultat de l'alternance entre un cœur planaire et un autre non-planaire.	∞	$\sqrt{2} \cdot h(E_0 \Delta E)^{1/2}$

Tableau III-6 : Formes analytiques de différents potentiels de Peierls, $E(y)$, ainsi que leur contrainte de Peierls (τ_p) et énergie de formation d'un décrochement (U_d) associées. Les expressions d' U_d sont obtenues en faisant l'approximation dite « de tension de ligne » détaillée plus bas, sauf dans le cas du potentiel abrupt.

3.2.4.2 Approximation à forte contrainte

La configuration générale du problème est celle du domaine ① de la Fig. III-14a, présentée plus en détail dans la Fig. III-16. L'approximation de forte contrainte néglige les interactions élastiques entre les différentes parties de la bosse face à la variation de l'énergie de la ligne nécessaire à la formation de cette bosse à partir d'une position d'équilibre (y_0) sous contrainte (pour laquelle on a $\tau b = \partial E / \partial y$).

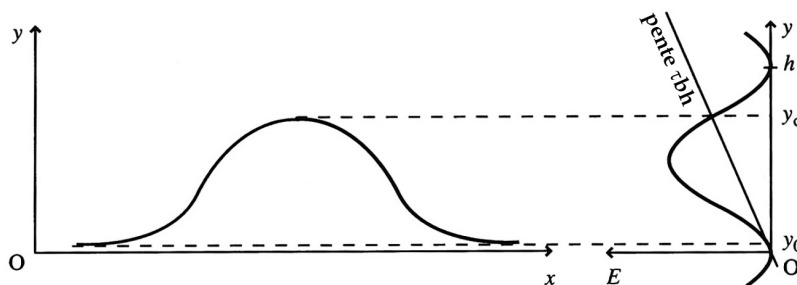


Fig. III-16 : Configuration de bosse métastable à l'équilibre et diagramme d'énergie (potentiel de Peierls) correspondant (Caillard and Martin, 2003b).

Par la suite nous présentons les différents calculs possibles, qui diffèrent selon que le potentiel soit dérivable ou non.

Cas de potentiels de Peierls dérivables

Pour les potentiels dérivables, l'énergie d'une configuration peut s'écrire comme l'intégrale de deux termes :

- L'énergie des segments élémentaires de la bosse, de longueur $\sqrt{dx^2 + dy^2}$, où l'énergie par unité de ligne $[E(y)]$ varie entre $E(y_0)$ et $E(y_0) + \Delta E$.
- Le travail réalisé par la contrainte τ sur chaque segment élémentaire entre y_0 et y .

$$U_b[y(x)] = \int_{-\infty}^{\infty} \left[E(y) \sqrt{1 + \left(\frac{dy}{dx} \right)^2} - E(y_0) - \tau b(y - y_0) \right] dx \quad (3.43)$$

Pour obtenir la valeur critique d' U_b il faudra trouver la forme de la bosse $[y(x)]$ qui minimise son énergie, ce qui peut se faire :

- de manière exacte (Dorn and Rajnak, 1964)
- approximativement, en prenant $dy/dx \ll 1$ pour faciliter le calcul analytique de l'intégrale.

Le calcul de Dorn et Rajnak

La forme de la configuration d'équilibre sous contrainte $(dy/dx)^2$ s'obtient en minimisant la fonctionnelle U_b , par l'intermédiaire de la condition d'Euler-Lagrange :

$$\left(\frac{dy}{dx} \right)^2 = \left(\frac{E(y)}{E(y_0) + \tau b(y - y_0)} \right)^2 - 1 \quad (3.44)$$

A partir de cette expression on peut calculer l'extension critique de la bosse (y_c) comme :

$$\left(\frac{dy}{dx} \right) = 0 \Rightarrow E(y_c) - E(y_0) = \tau b(y_c - y_0) \quad (3.45)$$

En combinant les trois expressions précédentes, on peut écrire l'énergie d'activation ($U_b^{(c)}(\tau)$) en fonction de la contrainte appliquée et le potentiel de Peierls comme :

$$U_b^{(c)}(\tau) = 2 \int_{y_0}^{y_c} \sqrt{E^2(y) - [E(y_0) - \tau b(y - y_0)]^2} dy \quad (3.46)$$

(le facteur 2 tient compte des deux parties symétriques de la bosse)

L'aire d'activation (A_b) peut alors se calculer comme :

$$A_b = \frac{V}{b} = \frac{1}{b} \frac{\partial U_b^{(c)}}{\partial \tau} \quad (\text{Caillard and Martin, 2003e}). \quad (3.47)$$

Kocks *et al.* (1975c) ont étudié l'allure de la bosse critique en fonction de la contrainte appliquée pour un potentiel sinusoïdal. La Fig. III-17 récapitule ses résultats. On constate ainsi que :

- à forte contrainte ($\tau \rightarrow \tau_p$), l'énergie d'activation tend vers 0 et la configuration s'approche de la position de contrainte maximale ($\tau = \tau_p$, $y = y_p$).
- à faible contrainte ($\tau \rightarrow 0$), l'énergie d'activation tend vers l'énergie de formation d'un double décrochement ($2U_d$). Cependant, bien qu'on tende vers la bonne limite, dans ce cas la configuration de la ligne est celle de deux décrochements bien formés, et on ne peut plus négliger les interactions élastiques. Rappelons ici que la situation inverse arrive en poussant le modèle de Hirth et Lothe (1982) vers les contraintes élevées.

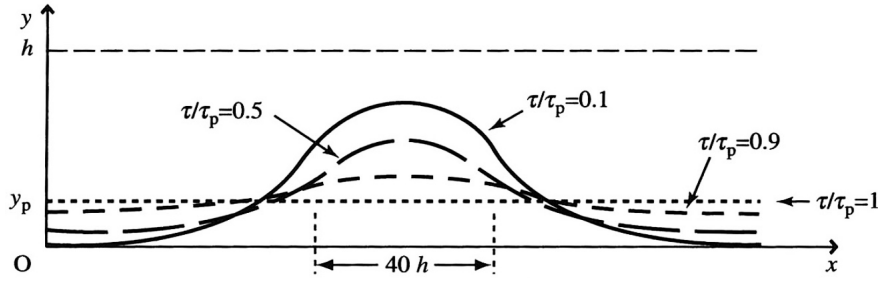


Fig. III-17 : Formes de « bosse » critiques à différentes contraintes pour un potentiel de Peierls sinusoïdale (Kocks *et al.*, 1975c). L'extension de la « bosse » en y est plus importante pour les faibles contraintes et nulle dans le cas limite $\tau = \tau_p$. La contrainte est suffisamment élevée comme pour que la partie aval de la bosse n'atteigne pas la vallée de Peierls suivante.

L'approximation à faible pente de la bosse

Une approche simplifiée pour la minimisation de l'intégrale (3.43) consiste à supposer que la pente de la bosse est faible ($dy/dx < 1$). Ceci permet de poursuivre les calculs analytiques en faisant un développement limité au premier ordre du terme $\sqrt{1 + (dy/dx)^2} \approx 1 + 1/2 (dy/dx)^2$.

Après calcul on obtient ainsi les formes de l'énergie et l'aire d'activation suivantes :

$$U_b^{(c)} = 2\sqrt{2E_0} \int_{y_0}^{y_c} \sqrt{E(y) - E(y_0) - \tau b(y - y_0)} dy \quad (3.48)$$

$$A_b = \sqrt{2E_0} \int_{y_0}^{y_c} (y - y_0) [E(y) - \tau b(y - y_0)]^{-1/2} dy \quad (3.49)$$

Ces résultats peuvent faire l'objet de nouvelles approximations à contraintes relativement faibles ou fortes (toujours dans la limite des « fortes contraintes »).

- à faible contrainte :
 - On néglige le travail réalisé par la contrainte.
 - $E(y_0)$ est similaire à celle dans les vallées de Peierls [$E(y_0) \approx E_0 \approx E(h)$]
 - A proximité de y_c ($y \approx h$) on a $E(y) - E(h) = \frac{E''(h)}{2} (h - y)^2$, ou $E''(h)$ est la courbure du potentiel de Peierls dans les vallées.
- à forte contrainte ($y \approx y_p$) : On peut faire un développement en polynômes au troisième ordre de $E(y) - \tau by$.

Toutes ces expressions sont regroupées plus bas dans le [Tableau III-8].

Cas d'un potentiel de Peierls abrupt

L'intérêt pratique de l'étude du cas d'un potentiel abrupt (non dérivable) provient de son utilité pour les développements théoriques que nous aborderons dans la section §3.3 de ce chapitre. Pour autant, ce type de potentiel ne peut pas être considéré comme réaliste.

Le potentiel n'étant pas dérivable, l'approche diffère sensiblement du cas précédent. Reprenant un argument proposé par Friedel [1959] pour décrire le glissement dévié entre plans basaux et prismatiques dans les matériaux hexagonaux compacts (HC), la forme critique de la bosse est un arc de cercle de rayon $R = \hat{T} / \tau b$ [Fig. III-18]. Dans ce cas, et pourvu qu'on ait $y_c < h$, l'énergie d'une configuration $[U_b(\tau)]$ se calcule comme la contribution de 4 termes :

- l'extraction du segment AB de la vallée de Peierls.
- la flexion du segment.
- le travail réalisé par la contrainte appliquée.
- deux demies constriction aux points A et B [$U_{constr}(\tau)$].

Au terme du calcul, Caillard obtient l'énergie d'activation suivante (Caillard and Martin, 2003d) :

$$U_b^{(c)}(\tau) = \frac{2^{5/2}}{3} \frac{E_0^{1/2} \Delta E^{3/2}}{\tau b} + U_{constr}(\tau); \quad (3.50)$$

Où l'expression d' U_{constr} pour CC a été établie de manière approximative par Escaig [1967], et peut devenir prépondérante à très forte contrainte :

$$U_{constr}(\tau) \approx 6.7 \mu b^3 \left(\frac{\tau_p - \tau}{\mu} \right)^2 \quad (3.51)$$

Ces expressions étant valides pour une extension maximale de la configuration critique de la bosse inférieure à la distance entre vallées de Peierls ($y_c \leq h$), les expressions (3.50) et (3.51) ne sont valables que jusqu'à une contrainte minimale (τ_{min}^b) telle que :

$$y_c = \frac{R\theta_c^2}{2} \approx \frac{\Delta E}{\tau b} \Rightarrow \tau > \tau_{min}^b = \frac{\Delta E}{hb} \quad (3.52)$$

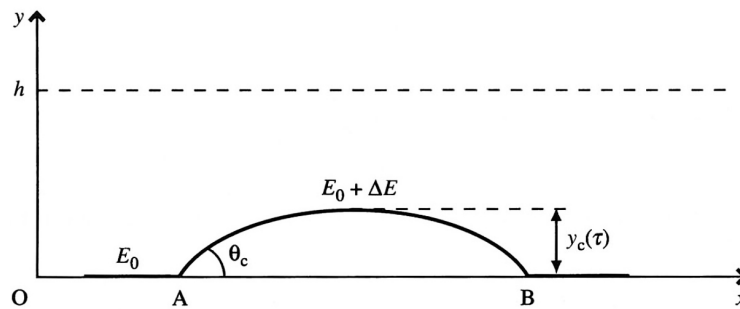


Fig. III-18 : Forme de « bosse » critique pour le potentiel de Peierls abrupt (Caillard and Martin, 2003b).

Bilan

Le Tableau III-7 et le Tableau III-8 résument les résultats analytiques de cette partie, avec notamment les différentes expressions de $U_b^{(c)}(\tau)$ pour les différentes formes du potentiel de Peierls et les différentes approximations décrites précédemment. Ainsi, selon le régime de contrainte et l'application considérée, on pourra les utiliser dans des lois de mobilité des dislocations vis adaptées.

	$U_b^{(c)}(\tau)$	$A_b(\tau)$
Exacte	$2 \int_{y_0}^{y_c} \sqrt{E^2(y) - [E(y_0) - \tau b(y - y_0)]^2} dy$	n/d [$A_b = (1/b)(\partial U_b^{(c)} / \partial \tau)$]
$dy/dx \ll 1$	$2\sqrt{2E_0} \int_{y_0}^{y_c} \sqrt{E(y) - E(y_0) - \tau b(y - y_0)} dy$	$\sqrt{2E_0} \int_{y_0}^{y_c} (y - y_0) [E(y) - \tau b(y - y_0)]^{-1/2} dy$
Pot. Abrupt	$\frac{2^{5/2}}{3} \frac{E_0^{1/2} \Delta E^{3/2}}{\tau b} + U_{constr}; U_{constr} \approx 6.7 \mu b^3 \left(\frac{\tau_p - \tau}{\mu} \right)^2$	$\frac{2^{5/2}}{3} \frac{E_0^{1/2} \Delta E^{3/2}}{\tau^2 b^2} = \frac{U_b^{(c)} - U_{constr}}{\tau b}$

Tableau III-7 : Formes analytiques des énergies et aires d'activation dans les approximations à forte contrainte du modèle des double décrochements : potentiels de Peierls dérivables (forme exacte et approximation de faible pente de la bosse) [Fig. III-16] et cas du potentiel abrupt [Fig. III-18] (Caillard and Martin, 2003b).

			$U_b^{(c)}(\tau)$	$A_b(\tau)$
Approx. de « faible pente de la bosse » ($dy/dx \ll 1$)	Anti-parabolique		$2 \cdot U_k \left(1 - \tau / \tau_p\right)^2$	n/d
	Approx. faible τ	Forme générale	$2U_k - h \sqrt{\frac{\hat{T}}{E''(h)}} \cdot \tau \left(1 + \ln \frac{\hat{\tau}}{\tau}\right)$	$h \sqrt{\frac{\hat{T}}{E''(h)}} \cdot \left(1 + \ln \frac{\hat{\tau}}{\tau}\right)$
		Potentiel Sinusoïdal	$E''(h) = \frac{2\pi^2}{h^2} \Delta E$	
		Potentiel d'Eshelby	$E''(h) = \frac{32}{h^2} \Delta E \quad ; \quad \hat{\tau} = 12\sqrt{3}\tau_p = 64 \frac{\Delta E}{hb}$	
	Approx. forte τ $\left(\tau \sim \tau_p\right)$ $\left(y \sim y_c\right)$	Forme générale	$\frac{96}{5} b^2 E_0^{1/2} \left[-2bE'''(y_p)\right]^{-3/4} (\tau_p - \tau)^{5/4}$	n/d
		Potentiel d'Eshelby	$\frac{12}{5} U_k \left[\frac{2}{3} \left(1 - \tau / \tau_p\right)\right]^{5/4}$	

Tableau III-8 : Formes analytiques des énergies et aires d'activation à forte contrainte dans l'approximation à « faible pente de la bosse » [Fig. III-16] : expressions pour les potentiels de Peierls considérés [Fig. III-15 et Tableau III-6] (Caillard and Martin, 2003b). Pour le potentiel d'Eshelby et le sinusoïdal, les expressions sont obtenues après des nouvelles approximations faites pour des contraintes relativement faibles ou fortes (toujours à forte contrainte dans l'approximation $dy/dx \ll 1$).

3.2.4.3 Approximation à faible contrainte

H&L écrivent $U_{dd}(l, \tau)$ en prenant compte trois contributions [Fig. III-14c] :

- l'énergie de formation d'un dd dans un potentiel périodique de Peierls ($2U_d$),
- Les travaux réalisés par l'interaction élastique entre les deux décrochements (U_{int}) (Seeger and Schiller, 1962) et la contrainte appliquée (U_τ) :

$$U_{dd}(l, \tau) \approx U_{id}(l, \tau) = 2U_d + U_{int} + U_\tau \quad (3.53)$$

En choisissant une valeur intermédiaire entre vis [H&L 8.48] et coin [H&L 8.50] pour U_{int} , on obtient :

$$U_{id}(\tau, \Delta x) = 2U_d - \frac{\mu h^2 b^2}{8\pi \Delta x} - hb \Delta x \tau \quad (3.54)$$

Cette énergie est maximale pour une séparation critique (Δx_c) [cf, eq.(3.30)] :

$$\Delta x_c(\tau) = \left(\frac{hb}{8\pi} \frac{\mu}{\tau} \right)^{1/2} \quad (3.55)$$

On obtient alors l'énergie d'activation correspondante :

$$U_{id}^{(c)}(\tau) = U_{id}(\tau, \Delta x_c) = 2U_d - (hb)^{3/2} \left(\frac{\mu \tau}{2\pi} \right)^{1/2} \quad (3.56)$$

Nous notons par ailleurs que dans leur analyse complète, H&L avaient choisi le potentiel sinusoïdal pour estimer U_d [Tableau III-6].

3.2.4.4 La transition entre les deux domaines précédents

Il s'agit ici de relier les deux approximations présentées précédemment. Pour cela, il faut tout d'abord établir la limite de validité des différents modèles. Caillard utilise le cas simple du potentiel abrupt afin d'en estimer les ordres de grandeur.

- *l'approximation à faible contrainte* est valable tant que la séparation critique entre décrochements du modèle de H&L [Δx_c (3.55)] est supérieure à la largeur d'un décrochement (w), soit $w \approx h / \theta_c = h \sqrt{E_0 / 2\Delta E}$ pour le potentiel abrupt. La contrainte maximale ainsi obtenue, $\tau_{\max}^{(ik)} = \tau_p / 2\pi^2$ (3.57), est plus restrictive que celle préconisée par H&L eux-mêmes : $\tau_{\max} = \tau_p / 2\pi$ (3.31). Dans le cas du fer, en utilisant la valeur de $\tau_p = 1.1$ GPa issue des calculs *ab initio* (Shimizu *et al.*, 2007), ces deux estimations aboutissent à environ 55 MPa et 175 MPa respectivement.

$$\Delta x_c > w \Leftrightarrow \tau < \tau_{\max}^{(ik)} = \frac{\mu b}{4\pi h} \frac{\Delta E}{E_0} \stackrel{E_0 \approx 1/2 \mu b^2}{\approx} \frac{\Delta E}{2\pi h b} \stackrel{\tau_p \approx \pi \Delta E / h b}{\approx} \frac{\tau_p}{2\pi^2} \quad (3.57)$$

- *l'approximation forte contrainte* est valable tant que le sommet de la bosse n'approche pas la vallée de Peierls suivante. Pour le potentiel abrupt cela se traduit par la condition (3.52) : $\tau_{\min}^b = \Delta E / h b \approx \tau_p / \pi$ (soit environ 350 MPa dans le fer).

Entre ces deux cas extrêmes, plusieurs approches ont été proposées, sans qu'il y ait de consensus sur le sujet. On retrouve ainsi des arguments en faveur d'une transition continue (Suzuki *et al.*, 1991) et d'autres en faveur d'une transition discontinue (Seeger, 1984). Escaig (1968b) a ainsi développé un modèle à tension de ligne variable dans le cadre du potentiel abrupt, et abouti à une transition discontinue.

Les simulations atomistiques réalisées par Duesberry [1983] avec un cœur non-planaire indiquent quant à elles que la transition se fait de manière continue :

- L'énergie d'une paire de décrochements sans contrainte appliquée, $U_{pk}^{(0)}$, varie continument le long du domaine de transition (comme illustré par la Fig. III-14(b,c)). Farenc *et al.* (1995) ont montré que cela conduit $A_{kp}(\tau)$ à varier de manière monotone.
- Les formes des « bosses » obtenues sont proches de celles de la Fig. III-17, obtenues analytiquement par Kocks *et al.* (1975c) pour le potentiel sinusoïdal.
- Les dislocations sous contrainte ne bougent pas loin du fond des vallées de Peierls, ce qui semble indiquer que le potentiel a un minimum de forte courbure. Parmi les potentiels analytiques présentés plus haut, les plus aigus seraient l'abrupt et l'anti-parabolique. Or le premier conduit à des « bosses » critiques en forme d'arc de cercle, ce qui n'est pas observé en MD. Le potentiel anti-parabolique semble donc le meilleur.

Le débat sur le régime de transition reste cependant ouvert.

Nous noterons finalement que des observations en MET in-situ dans les régimes de validité du mécanisme de dd montrent un glissement continu des vis (Caillard and Martin, 2003b). Ceci s'explique par de petits volumes d'activation, et donc des vitesses des dislocations qui ne sont pas très sensibles aux variations locales de la contrainte.

La Fig. III-19 et le Tableau III-9 résument les différents cas de figure abordés dans cette partie, en détaillant les approximations faites dans chaque régime de contrainte, et les énergies d'activation correspondantes.

Gamme de contrainte	Faible $\tau_{\max}^{(ik)} \approx \frac{\Delta E}{2\pi bh}$	Transition $\tau_{\min}^{(b)} \approx \frac{\Delta E}{bh}$	Forte modérée	Forte	Très forte
Approximation	Interaction élastique entre décrochements	Tension de ligne variable (Escaig, 1968b)	« Bosse » critique		
Énergie d'activation	$U_{id}^{(c)}(\tau)$ Eq. (3.56) Tout potentiel	U_E Potentiel abrupt Eq. 4.39 de Caillard et Martin (2003b)	$U_b^{(c)}(\tau)$ Pot sinusoïdal ou d'Eshelby [Tableau III-8]	$U_b^{(c)}(\tau)$ Potentiel abrupt [Tableau III-7] ou anti-parabolique [Tableau III-8]	$U_b^{(c)}(\tau)$ Potentiel d'Eshelby [Tableau III-8] ou abrupt Eq. (3.51)

Tableau III-9 : Résumé des approximations et expressions utilisées pour estimer l'énergie d'activation pour le mécanisme des double décrochements dans différents intervalles de contrainte (Caillard and Martin, 2003b).

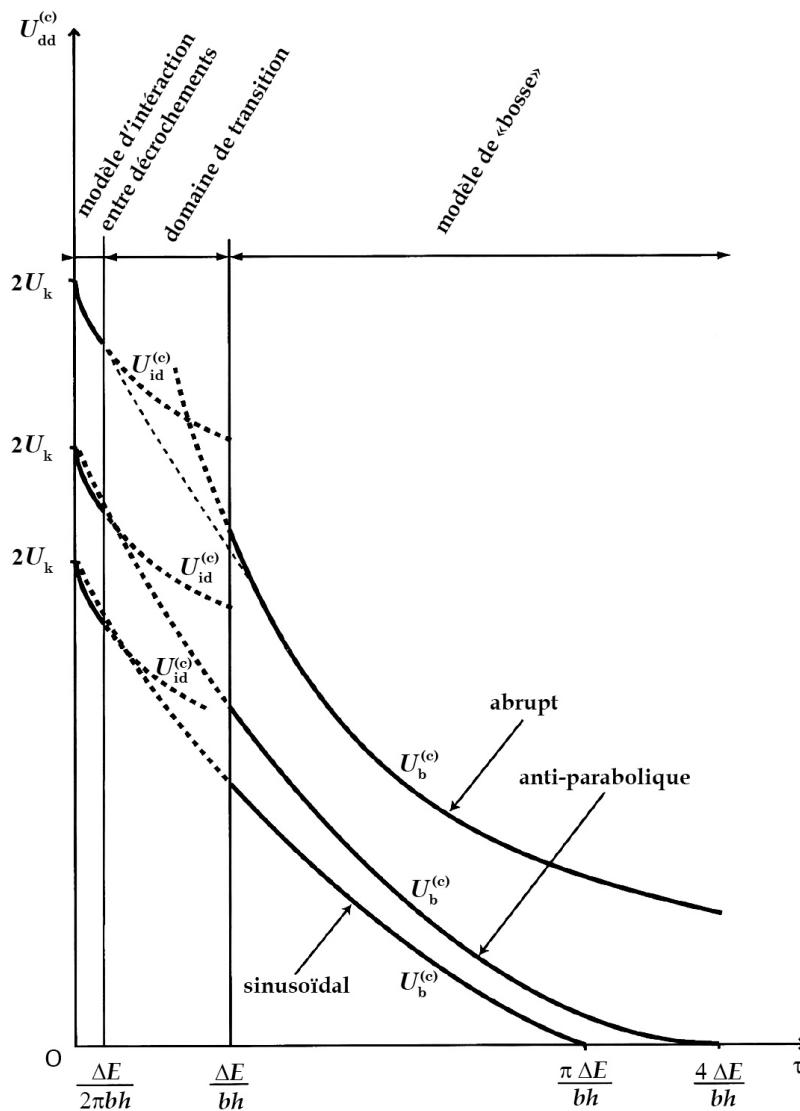


Fig. III-19 : Énergies d'activation en fonction de la contrainte pour le mécanisme de double décrochements (Caillard and Martin, 2003b). On distingue les domaines de validité des approximations à faible et forte contrainte, avec une transition encore débattue.

3.2.4.5 Ajustement de ΔG à partir de mesures expérimentales.

Expressions de ΔG pour sa détermination expérimentale

Pour déterminer l'énergie d'activation expérimentalement, on écrit d'abord la variation de l'énergie libre de Gibbs (ΔG) en fonction des variations d'enthalpie (ΔH) et d'entropie (ΔS):

$$\Delta G = \Delta H - T\Delta S \quad (3.58)$$

On s'intéresse ici à la variation d'énergie associée au franchissement thermiquement activé d'obstacles par les dislocations. Dans ce cas, on utilise aussi une loi d'Arrhenius pour formuler la vitesse de déformation macroscopique d'un matériau sous contrainte de la forme :

$$\dot{\epsilon} = \dot{\epsilon}_0 \cdot \exp\left(-\frac{\Delta G}{k_B T}\right) \quad (3.59)$$

Où :

- $\dot{\epsilon}_0$: est un paramètre qui dépend de la densité et configuration des dislocations, mais en principe pas de la température.
- ΔG : est la variation de l'énergie libre de Gibbs du système pour amener de manière isotherme une dislocation de sa position d'équilibre au col énergétique de l'obstacle.

Le lien macro-micro se fait alors à partir de la relation d'Orowan, en prenant en compte la densité moyenne de dislocations mobiles (ρ_m) et la vitesse moyenne de celles-ci (v_{disloc}) :

$$\dot{\epsilon} = \rho_m b v_{disloc} \quad (3.60)$$

Moyennant l'hypothèse $\rho_m = cte$, on peut alors facilement relier les mesures macroscopiques de ΔG à l'énergie d'activation de la loi de vitesses des dislocations [cf. eq.(3.19)]. Pour ce faire, on extrait ΔG à partir de (3.59) :

$$\Delta G = -k_B T \ln(\dot{\epsilon}/\dot{\epsilon}_0) \quad (3.61)$$

Ce qui permet d'écrire en dérivant par rapport à T à contrainte appliquée (τ_a) constante :

$$\Delta G = k_B T^2 \left| \frac{\partial}{\partial T} \ln(\dot{\epsilon}/\dot{\epsilon}_0) \right|_{\tau_a} + T \left| \frac{\partial \Delta G}{\partial T} \right|_{\tau_a} \quad (3.62)$$

On reconnaît alors les deux termes de l'équation(3.58), soit :

$$\Delta H = k_B T^2 \left| \frac{\partial}{\partial T} \ln(\dot{\epsilon}/\dot{\epsilon}_0) \right|_{\tau_a} \quad (3.63)$$

$$\Delta S = - \left| \frac{\partial \Delta G}{\partial T} \right|_{\tau_a} \quad (3.64)$$

Comme on le verra plus tard, sous certaines approximations ΔH peut être calculé avec l'équation (3.63) à partir de mesures expérimentales. Cependant, ceci n'est pas le cas de ΔS , pour laquelle il n'existe pas de méthode directe. Dans le cas d'obstacles localisés, Schoeck (1965) a toutefois réussi obtenir une expression globale pour ΔG , que l'on peut estimer à partir des mesures expérimentales. Son raisonnement part de la forme générale suivante pour ΔG :

$$\Delta G(\tau^*) = \Delta g(\tau^*) - \tau^* \cdot V(\tau^*) \quad (3.65)$$

Où :

- Δg : est la variation de ΔG induite par le « *misfit* » local des atomes au col.
- τ^* : est la contrainte effective de la ligne, calculée ici comme : $\tau^* = \tau_a - \tau_i$ (3.66)
- τ_i : est la contrainte interne à long portée issue du champ élastique des autres dislocations dans le cristal.
- V : est le volume caractéristique du processus thermiquement activé considéré.

Dans le cas du franchissement d'un obstacle sur une distance (Δy) par un brin de dislocation de longueur Δx , V s'écrit :

$$V(\tau^*) = b \cdot \Delta x(\tau^*) \cdot \Delta y(\tau^*) \quad (3.67)$$

Le deuxième terme de l'expression (3.65), n'est donc que le travail réalisé par la contrainte effective pour amener la dislocation du point d'équilibre jusqu'au col énergétique de l'obstacle.

Par ailleurs, si l'on tient compte de la proportionnalité entre τ_i et le module de cisaillement du matériau (μ), on obtient alors, après dérivation de l'expression (3.65) :

$$\left| \frac{\partial \Delta G}{\partial T} \right|_{\tau_a} = \left| \frac{\partial \Delta g}{\partial T} \right|_{\tau^*} + \frac{\tau_i}{\mu} \frac{\partial \mu}{\partial T} \cdot V \quad (3.68)$$

Finalement, sous l'hypothèse additionnelle que la variation de Δg est essentiellement d'origine élastique, elle est donc aussi proportionnelle à μ . Dans le Chapitre V nous reviendrons sur cette hypothèse et la validité de cette formule, mais l'on se contentera ici de suivre la démarche traditionnelle, en réécrivant (3.62) à l'aide de (3.63) et (3.68) pour obtenir (Schoeck, 1965):

$$\Delta G = \frac{\Delta H + T \frac{\partial \mu}{\partial T} \frac{\tau_a}{\mu} V}{1 - \frac{T}{\mu} \frac{\partial \mu}{\partial T}} \quad (3.69)$$

Pour évaluer cette expression à partir de mesures expérimentales, on utilisera l'équation (3.63) pour ΔH , les mesures de $\partial \mu / \partial T$ [Fig. III-20], et l'expression suivante pour V :

$$V = - \left| \frac{\partial \Delta G}{\partial \tau_a} \right|_T = k_B T \left| \frac{\partial}{\partial \tau_a} \ln(\dot{\epsilon} / \dot{\epsilon}_0) \right|_T \quad (3.70)$$

Notons ici que l'utilisation de l'équation (3.70), dont l'origine est la dérivation de (3.65) par rapport à τ_a , est controversée. En effet, certains auteurs (Conrad *et al.*, 1961) notent qu'elle devrait présenter d'autres termes de par la dépendance en contrainte de Δg , Δx , et Δy . Schoeck défend cependant qu'elle représente bien le volume d'activation du processus, et elle a de fait toujours été utilisée à ce titre sous certaines approximations.

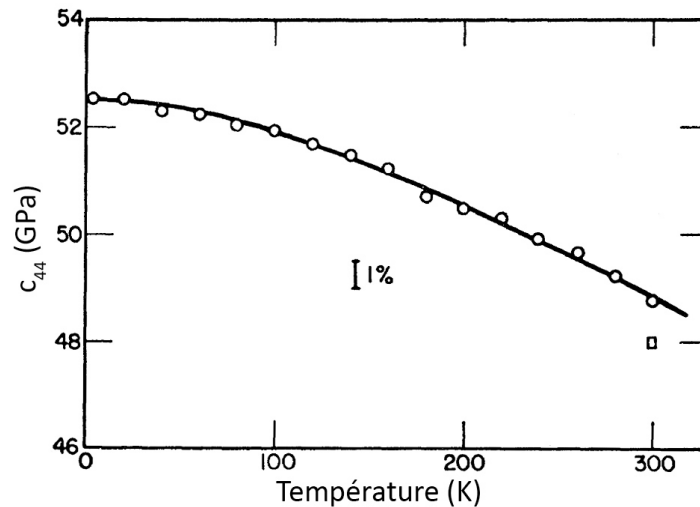


Fig. III-20 : Variation du module de cisaillement dans le fer entre 4 et 300K (Rayne and Chandrasekhar, 1961)

Détermination expérimentale du volume d'activation (V)

Le volume d'activation peut être obtenu directement à partir des essais de sauts de vitesse de déformation à température constante en utilisant l'approximation de (3.70) suivante :

$$V = k_B T \left| \frac{\partial}{\partial \tau_a} \ln(\dot{\epsilon}/\dot{\epsilon}_0) \right|_T \approx k_B T \cdot \frac{\ln(\dot{\epsilon}_2/\dot{\epsilon}_1)}{\tau_2 - \tau_1} \quad (3.71)$$

Dans (3.71) les contraintes τ_2 et τ_1 sont celles observées avant et après le changement brusque entre deux vitesses de déformation différentes : $\dot{\epsilon}_1$ et $\dot{\epsilon}_2$. On suppose par ailleurs que lors de ce saut la microstructure n'a pas le temps d'évoluer, et donc les termes $\dot{\epsilon}_{1,0}$ et $\dot{\epsilon}_{2,0}$ s'annulent.

Détermination expérimentale de l'enthalpie (ΔH)

Pour déterminer ΔH à partir de mesures expérimentales on préférera développer l'expression (3.63) en fonction de V (3.70) sous la forme :

$$\Delta H = k_B T^2 \left| \frac{\partial}{\partial T} \ln(\dot{\epsilon}/\dot{\epsilon}_0) \right|_{\tau_a} = -k_B T^2 \left| \frac{\partial}{\partial \tau_a} \ln(\dot{\epsilon}/\dot{\epsilon}_0) \right|_T \left| \frac{\partial \tau_a}{\partial T} \right|_{\dot{\epsilon}} = -TV \left| \frac{\partial \tau_a}{\partial T} \right|_{\dot{\epsilon}} \quad (3.72)$$

Le volume d'activation pouvant être obtenu selon (3.71), on n'a plus qu'à déterminer le troisième facteur de cette expression. Cela se fait à travers des essais de saut de température à vitesse de déformation constante. Encore une fois, cette approximation suppose que la microstructure ne varie pas de manière significative lors du saut, ce qui nécessite des changements de température très rapides (Chaussidon, 2007).

Détermination expérimentale de l'entropie (ΔS)

Nous avons vu ci-dessus qu'il n'existe pas de moyen directe pour déterminer ΔS . Cependant, nous disposons maintenant des moyens expérimentaux pour la détermination de ΔH (3.72), V (3.71), et $\partial \mu / \partial T$ [Fig. III-20], avec lesquels on peut utiliser désormais la formule de Schoeck (3.69) pour obtenir la valeur globale de ΔG , puis ΔS par soustraction de ΔH selon (3.58). La première étude dont on ait connaissance date de 1970 (Spitzig and Keh, 1970b). Dans leur travail, Spitzig et Keh obtiennent une différence de seulement 5% entre les mesures de ΔG et ΔH , avec ΔS de l'ordre de $10^{-4} \text{ eV.K}^{-1}$ et pratiquement constante entre 77K et 295K. Nous avons vérifié ce résultat en appliquant le même raisonnement à ceux de Groh et Conte (1971).

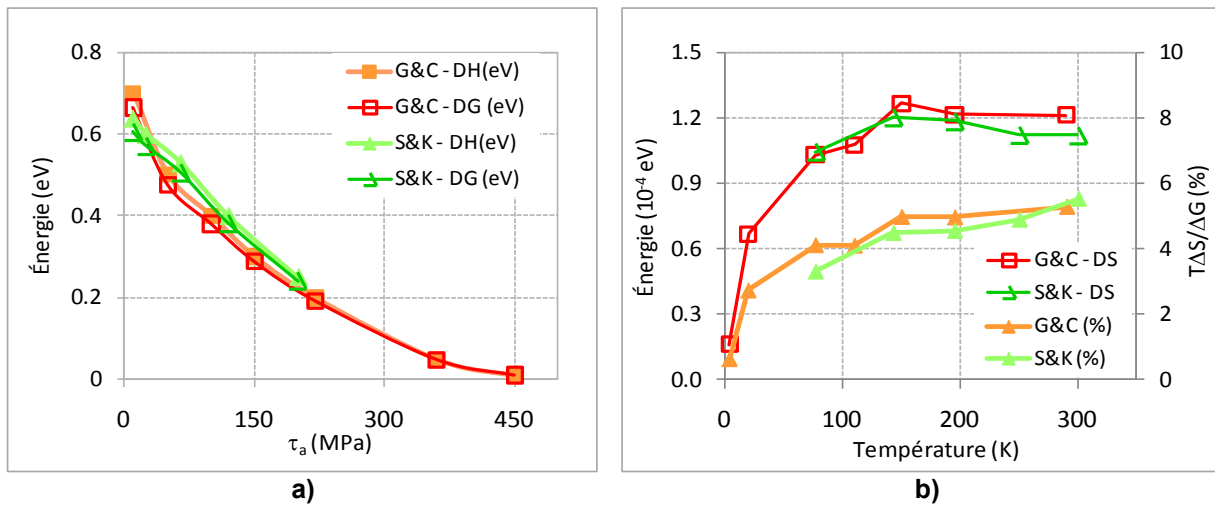


Fig. III-21 : Évaluation de la part de ΔS dans l'énergie d'activation mesurée dans le fer : **a)** Evolution de ΔG et ΔH avec la contrainte appliquée ; **b)** évolution de ΔS avec la température et pourcentage de $T\Delta S$ face à ΔG . Les données expérimentales sont issues des travaux de Spitzig et Keh (1970b) et Groh et Conte (1971), et les calculs de ΔS utilisent l'expression (3.69).

Dans la pratique, tous les auteurs négligent donc le terme entropique, simplifiant l'équation (3.58) sous la forme :

$$\Delta G = \Delta H - T\Delta S \approx \Delta H \quad (3.73)$$

Ajustement expérimental de $\Delta G(\tau)$ à partir de $\tau_y(T)$

Les mesures expérimentales de ΔH effectuées à partir de la relation (3.72) sur des monocristaux de fer pur montrent une relation linéaire avec la température jusqu'à environ 300K. C'est aussi le cas lorsqu'on utilise une méthode alternative à partir d'essais de fluage et relaxation, que nous ne détaillerons pas ici [voir aussi Groh et Conte (1971)]. Cela conduit donc à écrire ΔH sous la forme :

$$\Delta H = Ck_B T \quad (3.74)$$

Où la constante peut être dégagée des expressions (3.61) et (3.72) comme :

$$C = -\ln(\dot{\epsilon}/\dot{\epsilon}_0) = -\frac{V}{k_B} \left| \frac{\partial \tau_a}{\partial T} \right|_{\dot{\epsilon}} \quad (3.75)$$

Pour ajuster la variation expérimentale de l'énergie d'activation avec la contrainte effective (on s'intéresse ici seulement à l'effort employé pour franchir la barrière d'énergie de l'obstacle) [Fig. III-21a], on utilise l'expression empirique suivante (Kocks *et al.*, 1975f):

$$\Delta G(\tau^*) \approx \Delta H(\tau^*) = \Delta H_0 \left[1 - \left(\frac{\tau^*}{\tau_0} \right)^p \right]^q \quad (3.76)$$

Dans (3.76), souvent appelée « loi de Kocks », les paramètres ΔH_0 et τ_0 correspondent physiquement à la hauteur de la barrière en absence de contrainte et la contrainte nécessaire pour la franchir à 0K (contrainte de Peierls pour le mécanisme de doubles décrochements) respectivement, si bien qu'on retrouve $\Delta G(0\text{MPa}) = \Delta H_0$ et $\Delta G(\tau_0) = 0$. Les deux autres paramètres, p et q , contrôlent la pente de la courbe de chaque côté, tel que schématisé sur la Fig. III-22.

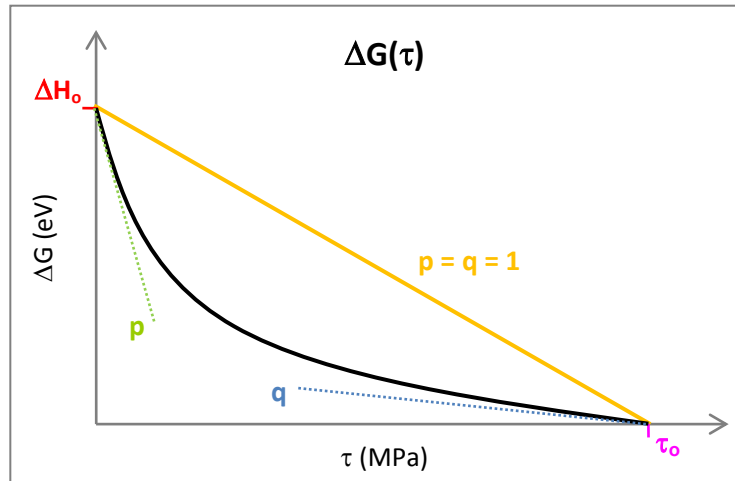


Fig. III-22 : Schéma de base des paramètres d'une loi de Kocks (3.76) pour ajuster l'énergie d'activation thermique $\Delta G(\tau)$

De fait, les valeurs de p et q déterminent la forme énergétique de l'obstacle (potentiel) à franchir. Le Tableau III-10 rassemble quelques exemples génériques fournis par Kocks *et al.* (1975f) eux-mêmes.

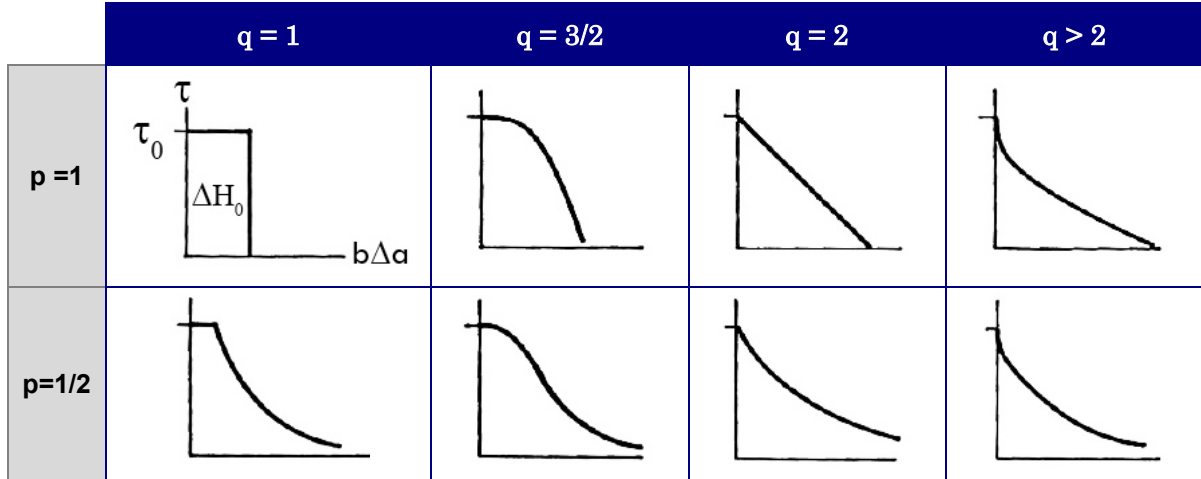


Tableau III-10 : Profils d'obstacles à courte portée décrits par la loi de Kocks (3.76) selon la valeur des paramètres p et q .

L'ajustement des paramètres de la loi de Kocks se fait à partir de la variation de τ^* avec la température, dont l'expression peut se dégager en combinant (3.74) avec (3.76) pour obtenir :

$$\tau^*(T) = \tau_0 \left[1 - \left(\frac{C \cdot k_B T}{\Delta H_0} \right)^{1/q} \right]^{1/p} \quad (3.77)$$

Dans la pratique, on ajuste les paramètres de (3.77) à partir de mesures expérimentales de la limite d'élasticité en traction à différentes températures pour une même vitesse de déformation, $\tau_y(T)$, qu'il faut donc relier à $\tau^*(T)$. Pour ce faire, on décompose d'abord la contrainte effectivement appliquée (τ_y) sous la forme :

$$\tau_y = \tau^* + \tau_f + \tau_\mu \quad (3.78)$$

où :

- τ_f : contrainte de friction réseau (interactions de contact dislocation-dislocation ou dislocation-défauts).
- τ_μ : contrainte interne résultat des interactions entre dislocations à long distance.

Dans l'approche traditionnelle, on fait l'hypothèse de l'invariance avec la température des termes de contrainte interne et friction de réseau :

$$\tau_f + \tau_\mu = cte \approx \tau_y(T \geq T_{at}) \quad (3.79)$$

où T_{at} est la température « athermique » constatée expérimentalement.

La contrainte nécessaire au franchissement de la barrière (τ^*) est alors déterminée par l'approximation :

$$\tau^*(T) \approx \tau_y(T) - \tau_y(T_{at}) \quad (3.80)$$

Notons ici que tout au long de ce chapitre nous avons utilisé des cisssions résolues dans le plan de glissement de la dislocation. Lorsque la démarche ci-dessus est utilisée pour un polycristal il faut relier la limite d'élasticité macroscopique (σ_y) et la cisssion résolue associée (τ_y). Ceci se fait à travers le facteur de Taylor ($M \approx 0.3$ dans les alliages fer CC) de la forme :

$$\tau_y = M \sigma_y \quad (3.81)$$

Par ailleurs, l'ajustement à partir de l'équation (3.77) sous l'approximation (3.80) revient à s'assurer que la valeur de la probabilité de succès (le terme exponentiel) vaut toujours $\exp(-C)$ pour les valeurs de $\tau_y(T)$ tant que $T \neq 0$. Cette valeur constante de la probabilité de succès d'une nucléation, unie à l'hypothèse d'un terme pré-exponentiel constant dans la loi de mobilité et la densité des dislocations, assure qu'on retrouve bien une même vitesse de déformation pour toutes ces valeurs de $\tau_y(T)$.

Il convient de noter toutefois que **la valeur de τ_0 ainsi obtenue par extrapolation de la limite d'élasticité vers 0K ne peut pas être la contrainte de Peierls**. En effet, la valeur ainsi extrapolée à 0K ne serait pas celle qui assure le franchissement de la barrière à température nulle, mais la forme limite de celle qui assure que l'on avance toujours à la vitesse de déformation imposée à température non nulle en s'approchant de 0K.

Comme on le verra dans les applications pratiques [§3.6.3], cette contrainte est de l'ordre de 360MPa pour des essais classiques à $\dot{\epsilon} = 10^{-4} \text{ s}^{-1}$ sur les monocristaux de fer. Ainsi, tout en étant dépendante de la vitesse de déformation, elle est bien toujours inférieure à la contrainte de Peierls, tel qu'elle a été calculée *ab-initio* par exemple [$\tau_p \approx 1,1 \text{ GPa}$, (Shimizu *et al.*, 2007)]. La validité de l'ajustement en tant que tel ne s'étend donc pas jusqu'à 0K, où le terme de Boltzmann n'a plus de sens physique et l'exponentielle dévient indéterminée.

3.3 Le modèle de « *locking-unlocking* »

3.3.1 Introduction

Comme nous venons de le voir, dans les métaux CC, il est difficile d'expliquer la transition entre les régimes à forte et faible contrainte pour la mobilité des vis, à travers le seul mécanisme de doubles décrochements. Caillard propose de compléter cette analyse par un deuxième mécanisme, basé sur des transformations thermiquement activées de la structure du cœur de la dislocation (Caillard and Martin, 2003d).

Toujours dans le cadre des bases établies par Peierls (1940) et Nabarro (1947), Caillard note qu'en général, les dislocations d'un même caractère peuvent présenter plusieurs structures de cœur dans un même matériau :

- des structures énergétiquement équivalentes issues des symétries du réseau (Takeuchi, 1981).
- des structures non-équivalentes, l'une étant stable (d'énergie minimale) et les autres métastables [cas du HC (Vitek and Igarashi, 1991) ou la structure $L1_0$ (similaire au CFC) de certains alliages TiAl (Mahapatra *et al.*, 1995, Simmons *et al.*, 1997)].

Caillard distingue 3 transitions possibles entre différentes structures de cœur pour une dislocation :

- Une transition d'une configuration de cœur glissile à une autre configuration aussi glissile (ex : cas du cross-slip), que nous ne considérons pas ici.
- Le « *locking* », qui est une transition entre une configuration glissile (planaire) et une configuration sessile (non planaire) et moins énergétique.
- L'« *unlocking* », qui est une transition entre une configuration sessile (non planaire) et une configuration glissile (planaire) et plus énergétique.

Il est intéressant de noter que Vitek (1966) fût le premier à proposer que le mécanisme de doubles décrochements correspond de fait à un changement temporaire de la structure du cœur (non-planaire $\rightarrow$ planaire). Cependant, il est généralement admis que, bien que déformée pour traverser la vallée de Peierls, la structure de base du cœur se reforme immédiatement après.

Caillard propose que, pour une plage de températures et de contraintes donnée, on puisse atteindre une configuration de cœur planaire métastable, avec une transformation inverse (planaire $\rightarrow$ non-planaire) elle aussi activée thermiquement. La possibilité de cette transformation aboutit à un mécanisme de « *locking-unlocking* », dans lequel la dislocation peut, en adoptant un cœur planaire métastable (« *unlocking* »), glisser librement de plusieurs vallées de Peierls avant de se bloquer dans une configuration stable au fond d'une de ces vallées (« *locking* »). Ce mouvement saccadé s'appuie sur des observations MET in-situ de Caillard lui-même, montrant des dislocations qui avancent par à-coups.

Par la suite, nous analysons le modèle de Caillard en introduisant successivement les phénomènes de « *locking* » et « *unlocking* », le mécanisme résultant de leur combinaison (« *locking-unlocking* »). Dans la section suivante nous étudierons la transition entre ce mécanisme et celui de doubles décrochements, puis les observations expérimentales.

3.3.2 «Unlocking» ou la transformation du cœur de la dislocation vers une structure métastable

Caillard utilise ici le formalisme développé pour le calcul de la « bosse » critique avec un potentiel abrupt présentée précédemment. Comme présenté en Fig. III-23, la structure de cœur de la dislocation sessile s'étend en dehors du plan de glissement, alors que la partie courbée mobile, plus compacte, s'étale légèrement dans ce plan. La forme critique est celle d'un arc de cercle.

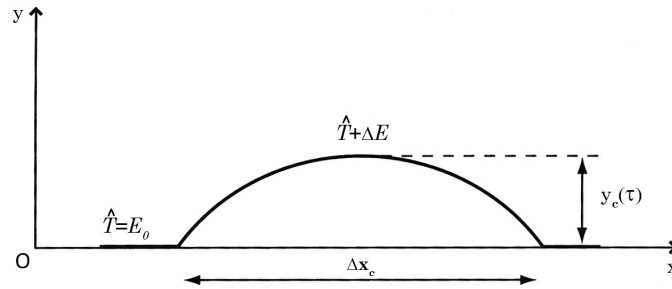


Fig. III-23 : Configuration de bosse critique pour la transformation sessile-glissile (y_c peut être supérieure à h). La dislocation est glissile à $y=0$, mais mobile dans la partie courbe qui s'étale dans son plan de glissement.

L'expression de l'énergie de la configuration critique est donc identique à celle de la « bosse » présentée précédemment [§3.2.4.2, eq. (3.50), Fig. III-18] :

$$U_b^{(c)} = \frac{2^{5/2}}{3} \frac{E_0^{1/2} \Delta E^{3/2}}{\tau b} + U_{constr} \quad (3.82)$$

L'interprétation physique de ces grandeurs est cependant différente au cas de l'analyse du potentiel de Peierls abrupt, puisqu'ici :

- la hauteur de la bosse, y_c , peut être très supérieure à h .
- ΔE n'est plus la hauteur du potentiel de Peierls, mais la différence d'énergie entre les deux structures de cœur.
- Bien que la structure glissile soit métastable, sa durée de vie est généralement courte.

Dans ce cas, par analogie avec le modèle des dd, on peut décrire la probabilité d'« *unlocking* » (par unité de temps et de ligne) comme un processus thermiquement activé de la forme :

$$P_{ul} = \nu_D \frac{b}{\Delta x_c^2} \exp\left(-\frac{U_b^{(c)}(\tau)}{k_B T}\right) \quad (3.83)$$

où Δx_c est la largeur de l'arc de cercle critique.

3.3.3 «*Locking*» ou la transformation du cœur de la dislocation vers une structure de cœur stable

L'idée originale fût développée par Escaig (1968a) et Coulon (1974) pour le glissement dévié dans le CFC, mais Caillard considère que ce mécanisme est analogue à celui de « *locking* ». Pour le cross-slip CFC, Escaig considère comme critique la configuration de la Fig. III-24, dans laquelle la dislocation est dissociée incomplètement dans le plan de moindre énergie. L'énergie d'activation serait alors celle d'une constriction dans le plan initial, plus celle d'une constriction incomplète dans le plan final de moindre énergie.

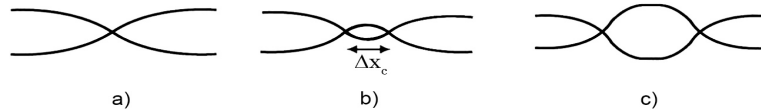


Fig. III-24 : Transformation d'une dislocation dissociée dans une configuration de plus basse énergie par dissociation dans un autre plan. **a)** Constriction dans le plan de haute énergie ; **b)** Configuration seuil ; **c)** mouvement latéral des deux constriction (Escaig, 1968b, Coulon *et al.*, 1974)

Caillard suggère que d'un point de vue général, une constriction implique la transition entre deux structures de cœurs différentes le long d'une même dislocation. Ainsi, selon le type du plan final, ces transformations dans une structure moins énergétique peuvent aboutir à :

- du glissement dévié si le plan final est glissile
- du « *locking* » s'il ne l'est pas.

Ce mécanisme étant considéré thermiquement activé comme les précédents, Caillard écrit la probabilité de « *locking* » par unité de temps et de ligne comme :

$$P_l = v_D \frac{b}{\Delta x_c^2} \exp\left(-\frac{U_l}{k_B T}\right) \quad (3.84)$$

Où :

- Δx_c est largeur de la configuration critique (plusieurs fois la taille du cœur)
- U_l est l'énergie d'activation, qui sera petite pour tenir compte de la forte probabilité de cette transition. L'aire d'activation (A_l) est de l'ordre de la taille de la configuration critique, et donc petite aussi par rapport à celle du mécanisme de « *locking* ».

3.3.4 Le mécanisme de «*Locking-unlocking*»

Comme nous l'avons mentionné dans l'introduction à cette partie, ce mécanisme, reposant sur la transformation de la structure de cœur de la dislocation entre une configuration glissile et une configuration sessile, fût proposé par Duesberry et Hirsch (1968) pour expliquer le glissement prismatique dans le hexagonale compact [voir Couret et Caillard (1989)]. Dans le cas du CC, schématisé dans la Fig. III-25, on a deux structures de cœur :

- une structure « sessile » (non-planaire), dans laquelle la dislocation se situe dans les creux des vallées de Peierls.
- une structure « glissile » (dissociée dans le plan de glissement), dans laquelle la dislocation avance à v_g , vitesse de glissement libre contrôlée par la diffusion de phonons.

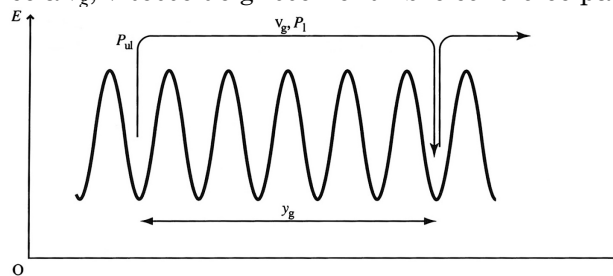


Fig. III-25 : Diagramme énergie-distance pour la transformation sessile-glissile en série (« *locking-unlocking* »)

On peut ainsi écrire la vitesse moyenne de la ligne à partir du ratio des probabilités de passage entre configurations calculées précédemment (3.83) et (3.84) :

$$\bar{v} = v_g \frac{P_{ul}}{P_l} = P_{ul} L \bar{y}_g = v_g \left(\frac{\Delta x_c^{(l)}}{\Delta x_c^{(ul)}} \right)^2 \exp \left(- \frac{U_b^{(c)} - U_l}{k_B T} \right) \quad (3.85)$$

Où :

- $\bar{y}_g = \frac{v_g}{P_l L} \propto \exp \frac{U_l}{k_B T}$ est la distance de vol moyenne.
- v_g est la vitesse de glissement libre contrôlée par la diffusion de phonons.
- L est la longueur du segment de dislocation vis considéré.
- L'énergie d'activation totale est positive car $U_b^{(c)} > U_l$.
- L'aire d'activation totale est positive car $A_{ul} \gg A_l$ ($A_{ul} - A_l \approx A_l$)

Il est important de noter la forme inhabituelle du **terme pré-exponentiel**, dont le ratio des probabilités conduit à la perte de sa partie fréquentielle ; ce terme pré-exponentiel devrait être inférieur à celui du modèle de doubles décrochements.

Par ailleurs, on notera que puisque $U_b^{(c)} > U_l$ et $A_{ul} \gg A_l$, toute augmentation de la température ou la contrainte se traduit par une augmentation plus importante de P_{ul} que de P_l , avec l'augmentation correspondante de la vitesse moyenne.

3.4 La transition entre les mécanismes de double décrochements et de « *locking-unlocking* »

Nous discutons ici de la prépondérance des mécanismes de double décrochement ou « *locking-unlocking* » en fonction de la contrainte et de la température. Pour cela, on considère la variation de deux paramètres du modèle de « *locking-unlocking* » :

- La distance moyenne de vol avant « *locking* », qui diminue avec T selon :

$$\bar{y}_g(T) \propto \exp(U_l / k_B T) \quad (3.86)$$

- La hauteur de l'arc critique pour l'« *unlocking* » (3.52) diminue avec τ selon :

$$y_c(\tau) \approx \Delta E / \tau b \quad (3.87)$$

On dérive alors deux seuils critiques pour la transition entre ces mécanismes :

- La température T_l (respectivement τ_l) en dessous (respectivement au-dessous) de laquelle le « *locking-unlocking* » est possible ($\bar{y}_g > h$).
- La contrainte minimale requise pour se maintenir dans un régime de « bosse » ($\tau_2 = \Delta E / \bar{y}_g b$), *i.e.* celle qui assure que l'extension critique de la bosse reste inférieure à la distance de vol moyenne ($y_c < \bar{y}_g$). En effet, si le mécanisme de « *locking-unlocking* » est activé, dans le cas où $y_c > \bar{y}_g$ on se situe dans un régime similaire à celui basé contrainte de H&L (1982) avec des « macro-décrochements » de taille $\bar{y}_g > h$.

Ces limites établies, le Tableau III-11 et la Fig. III-26 montrent les différents cas de figure. Reprenant la discussion sur la discontinuité des paramètres d'activation dans la transition entre les régimes de faible contrainte et forte contrainte du mécanisme de doubles décrochements [§3.2.4.4], on note que :

- les cas de la Fig. III-26a) et b) conduisent à une transition continue puisque $\tau_2 = \tau_{\min}^{(b)}$.
- le cas Fig. III-26c) aboutit à une discontinuité entre τ_1 et τ_2 , correspondant dans ce cas à la « nucléation » de macro-décrochements par la formation de la structure de cœur métastable prédite par Caillard.

Temp	Figure	Seuils	contrainte	Mécanisme	Approximation
$T < T_1$ (toujours)	31 a)	$y_g = h$ $\tau_2 = \tau_{\min}^{(b)}$	$\tau < \tau_2$	dd	Interact. élastique + transition
			$\tau > \tau_2$		« bosse »
$T > T_1$ (parfois)	31 b)	$\tau_2 < \tau_1$	$\tau < \tau_2$	dd	Interact. élastique + transition
			$\tau_2 < \tau < \tau_1$		« bosse »
			$\tau > \tau_1$	Lock-Unlock	
	31 c)	$\tau_2 > \tau_1$	$\tau < \tau_1$	dd	Interact. élastique + transition
			$\tau_1 < \tau < \tau_2$	Macro-dd	
			$\tau > \tau_2$	Lock-Unlock	« bosse »

Tableau III-11 : Limites de validité des modèles « locking-unlocking » et doubles décrochements.

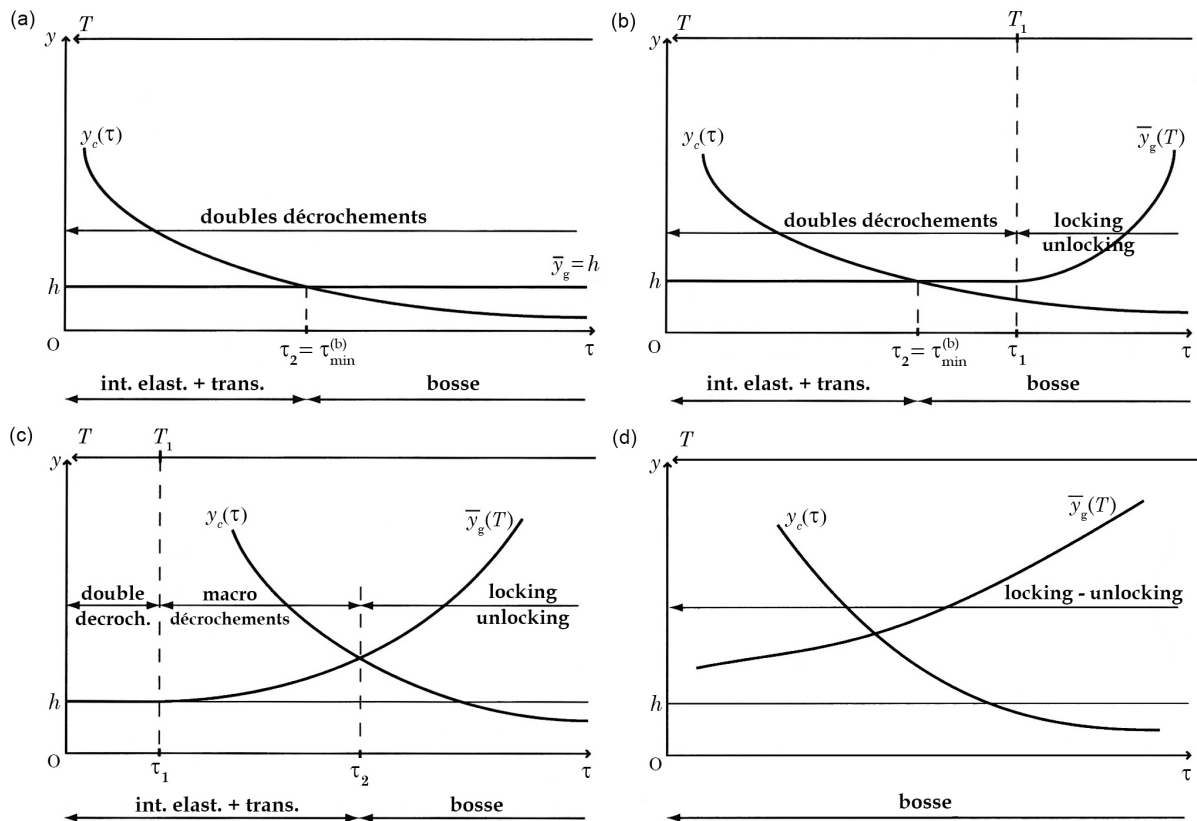


Fig. III-26 : Représentation schématique des domaines d'existence des différents mécanismes impliqués dans le mouvement des dislocations de cœur non-planaire. On distingue ces domaines à partir des évolutions relatives de la hauteur de l'arc critique pour l'« unlocking » [$y_c(\tau)$] et la distance moyenne de vol avant « locking » [$\bar{y}_g(T)$], pour lesquelles on distingue deux seuils : T_1 est la température minimale pour le mécanisme dd (avec la contrainte τ_1 correspondante), et τ_2 est la contrainte minimale pour le régime de « bosse » ($\tau_2 = \tau_{\min}^{(b)}$ dans le cas d'un mécanisme de doubles décrochements). Les figures (a) à (d)

se réfèrent aux différents valeurs relatifs entre τ_1 , τ_2 , et $\tau_{\min}^{(b)}$.

La Fig. III-27 illustre ce dernier cas de figure, où le mécanisme de « *locking-unlocking* » sert à expliquer la discontinuité de l'énergie d'activation en fonction de la contrainte. On obtient alors une première transition entre le mécanisme classique de doubles décrochements à faible contrainte (Hirth and Lothe, 1982) et celui de « *locking-unlocking* » avec formation de macro-décrochements, puis un passage vers un régime « *locking-unlocking* » en forme de « bosse » critique, qui conduit progressivement à un mécanisme de doubles décrochements à forte contrainte (Dorn and Rajnak, 1964).

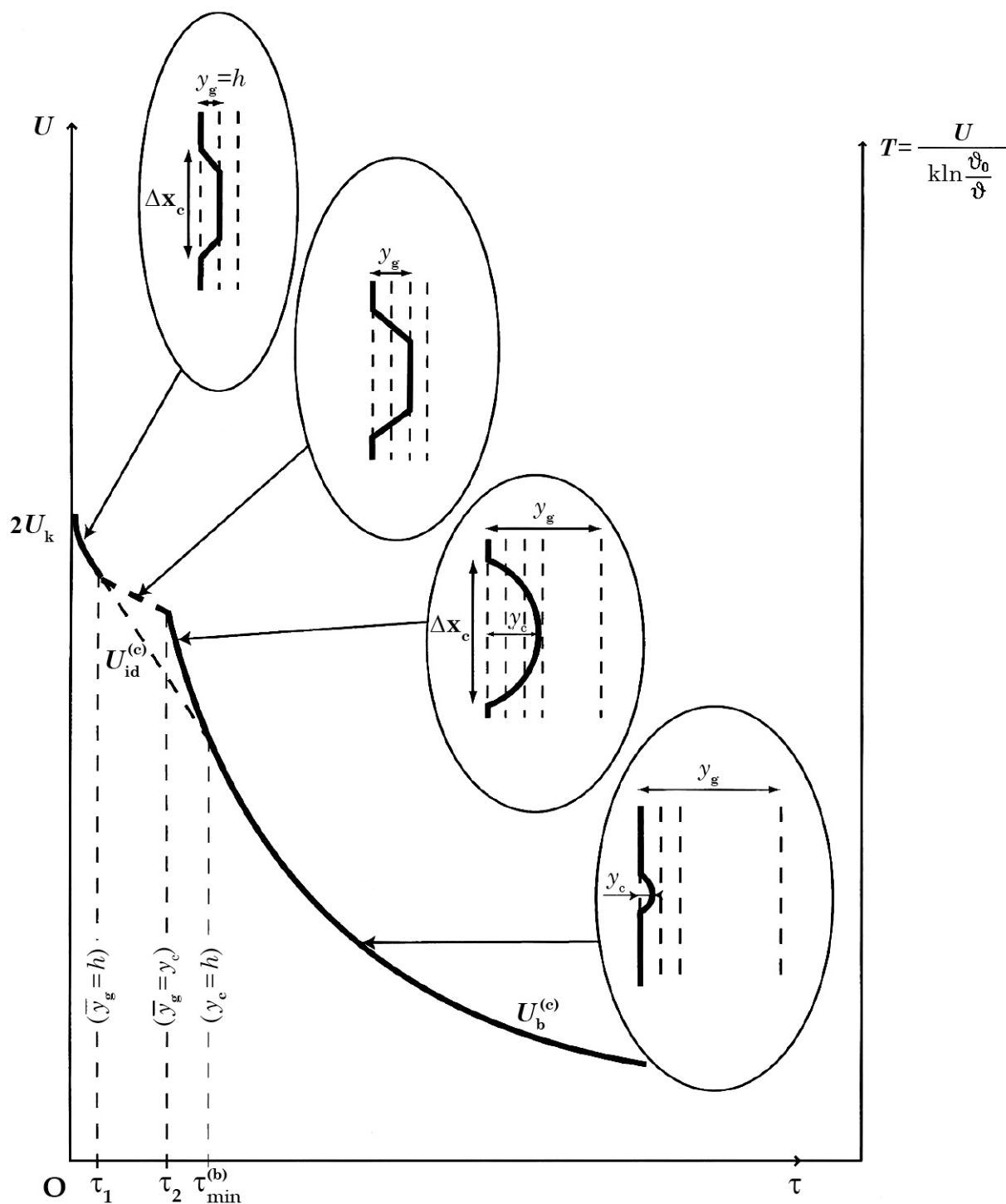


Fig. III-27 : Énergie d'activation vs. contrainte correspondant à l'expression (3.50), et montrant la transition entre le mécanisme de doubles décrochements et celui de « *locking-unlocking* » dans le cas de la Fig. III-26 c) (Caillard and Couret, 2002)

3.5 Observations expérimentales

Nous venons de voir et analyser tous les modèles théoriques et méthodes empiriques dont on ait connaissance pour déterminer la loi de vitesses thermiquement activée des dislocations vis dans le fer CC et ses alliages. Dans ce paragraphe nous nous centrerons sur des observations expérimentales précises à propos des paramètres d'activation. Ainsi, dans la Fig. III-29 on relève les points suivants [chapitre 6.3 du livre de Caillard et Martin (2003c)]

- Dans le fer pur on constate une petite bosse dans la cission critique à proximité de 250K [Fig. III-28a] (Quesnel *et al.*, 1975, Kuramoto *et al.*, 1979, Brunner and Diehl, 1997), ainsi qu'une discontinuité dans le facteur pré-exponentiel ($\dot{\epsilon}_0 / \dot{\epsilon}$) à la même température [Fig. III-28b].
- Dans le Fe-C (et autres éléments d'alliage) on observe que la discontinuité dans les paramètres d'activation se lisse jusqu'à disparaître pour des quantités relativement faibles (1% de Ni, et moins en C) [Fig. III-29].

Parmi les modèles théoriques qui pourraient expliquer cette discontinuité, on dénombre les deux suivants :

- Le potentiel à « bosse de chameau », dont nous n'avons pas effectué l'analyse, mais dont la forme ne semble pas être prédite par les calculs *ab-initio*.
- Le modèle présenté par Caillard lui-même avec la transition entre un régime de doubles décrochements et un régime « *locking-unlocking* » [§3.4]. Bien qu'il n'existe pas de preuve expérimentale directe des mécanismes introduits par Caillard, ce modèle a l'avantage d'inclure :
 - o la discontinuité du terme pré-exponentiel,
 - o la possibilité d'avoir des mouvements « par à-coups » (*jerky*) observés in-situ pour le fer pur ou des alliages Fe-3%Si à base température.

Dans ce régime de transition vers 250K, Caillard réfute les modèles basés sur le mécanisme de doubles décrochements avec des potentiels standards [Tableau III-6] car ils ne permettent pas de rendre compte de la discontinuité des paramètres d'activation observée expérimentalement. De la même manière, les ajustements expérimentaux utilisant une loi de Kocks pour évaluer $\Delta G(\tau)$ [§3.2.4.5] sont continus et ne pourraient donc pas rendre compte de ces observations.

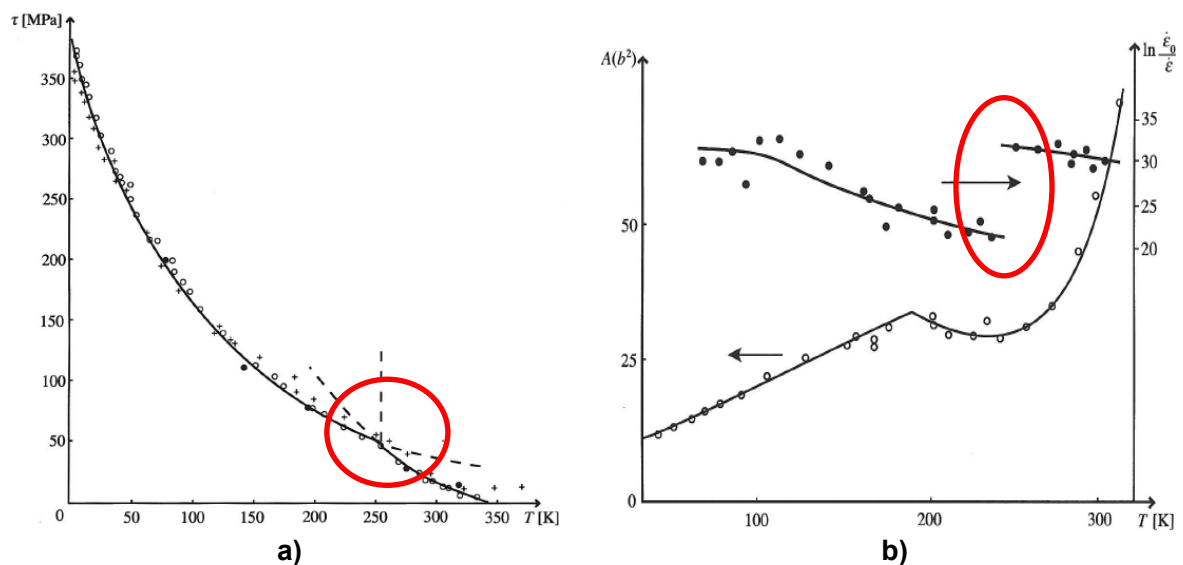


Fig. III-28 : Évolution des paramètres d'activation avec la température dans le fer pur : **a)** Discontinuité de la variation de la contrainte critique avec la température; **b)** Discontinuité dans l'aire d'activation et le facteur pré-exponentiel.

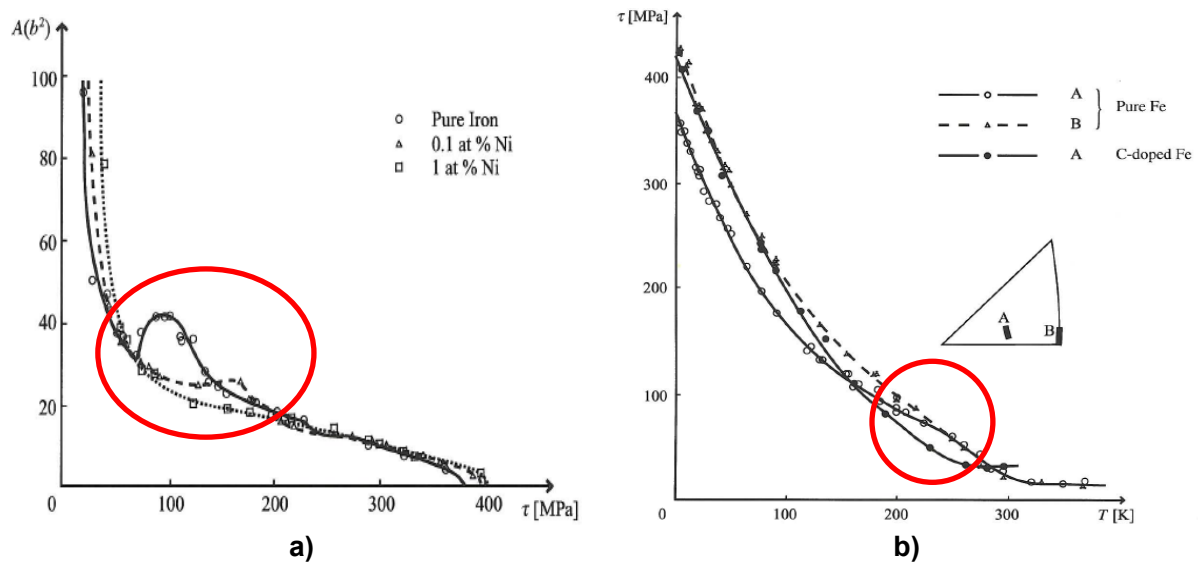


Fig. III-29 : Évolution des paramètres d'activation avec la température dans les alliages de fer: **a)** Influence de l'ajout de Ni dans l'aire d'activation; **b)** Influence du C sur la contrainte critique.

3.6 État de l'art en dynamique des dislocations (DD)

3.6.1 Introduction

Pour un code DD, la loi de mobilité des dislocations est un paramètre d'entrée essentiel. Or comme nous l'avons vu dans ce chapitre, il existe encore un grand nombre de difficultés à comprendre et modéliser la mobilité des vis dans le fer CC. À cette difficulté s'ajoute le défi numérique induit par l'énorme différence de mobilité entre dislocations vis et coin à basse température, ainsi que la facilité du glissement dévié que l'on analysera par la suite (§IV-2.4). Il n'est pas surprenant alors que le nombre d'études DD sur les alliages CC soit très réduit par rapport aux cas des CFC. Le premier travail à traiter le cas à basse température a été réalisé par Tang *et al.* (1998), et plus récemment trois thèses ont été soutenues à Nippon Steel (Shigesato, 2007), au CEA (Chaussidon, 2007) et à EDF (Naamane, 2008). Les thèses de Shigesato et Chaussidon furent toutes les deux dirigées à Grenoble INP et utilisent un modèle très similaire (code TRIDIS). Par ailleurs, les thèses de Chaussidon et Naamane visent, comme celle-ci, à étudier la plasticité de l'acier de cuve.

Dans cette partie, nous étudions les choix pratiques de Chaussidon et Naamane dans le cadre du mécanisme de doubles décrochements (dd) décrit précédemment. Dans les deux cas, ces auteurs utilisent le modèle de Guyot et Dorn [§3.2.2] sous certaines approximations, et avec une énergie d'activation ajustée expérimentalement à partir des mesures de la variation de la limite d'élasticité avec la température [§3.2.4.5]. Nous séparons donc cette analyse en deux parties, en commençant par le terme de nucléation (pré-exponentiel), puis l'énergie d'activation, que l'on comparera à l'autre modèle de doubles décrochements disponible [Hirth et Lothe, §3.2.3]. Finalement, nous discuterons un point particulier soulevé par Naamane : la dérive à haute température. Cela nous mènera à constater les limitations de ces choix, que l'on essaiera d'améliorer dans le Chapitre V.

3.6.2 Le terme pré-exponentiel

3.6.2.1 Analyse théorique

Chaussidon et Naamane reprennent l'analyse vibrationnelle de Guyot et Dorn [§3.2.2] pour calculer la fréquence d'attaque de la barrière. Ainsi, pour une dislocation de longueur L , ils écrivent la fréquence de nucléation de dd comme [cf. eq.(3.20)]:

$$v = v_D \frac{bL}{l_c^2} \quad (3.88)$$

avec :

- v_D : fréquence de vibration atomique (fréquence de Debye),
- $l_c(\tau, T)$: largeur critique d'un dd à contrainte τ et température T ,
- $v_D b / l_c$: fréquence de vibration de la dislocation de longueur d'onde l_c ,
- L / l_c : nombre de sites de nucléation de dd possibles.

3.6.2.2 Implémentation dans le code

Dans la pratique, ni Chaussidon ni Naamane ne reprennent entièrement l'analyse théorique faite ci-dessus, pour laquelle ils introduisent différentes approximations :

- *Chaussidon*, comme l'avaient fait Tang *et al.*(1998), utilise la formule théorique (3.88). Il fait cependant l'hypothèse que l_c reste constante : sa valeur est ajustée pour que les vis les plus rapides dans les simulations (celles d'une longueur couvrant l'ensemble du domaine étudié) rejoignent la vitesse des coins à la contrainte critique (τ_o) [Fig. III-30]. Cette vitesse [$v(\tau_o)$] d'environ 500m/s est alors fixée comme la vitesse maximale admissible dans les simulations, ce qui permet de garder des vitesses d'ordre de grandeur réaliste, et de stabiliser le code.
- *Naamane* garde aussi la proportionnalité en L dans la loi de mobilité, mais ajuste le reste de termes par une constante H à partir des résultats d'essais de traction sur des monocristaux et de la relation d'Orowan pour la vitesse de déformation (3.60).

Le Tableau III-12 montre les valeurs numériques utilisées par ces deux auteurs.

	Chaussidon	Naamane
Terme pré-exp [$h \cdot v$] (m.s ⁻¹)	$2.10^7 L$	$1,5.10^{11} L$

Tableau III-12 : Analyse du terme pré-exponentiel dans les modèles de Chaussidon et Naamane

On notera un écart de 4 ordres de grandeur entre ces deux pré-facteurs, ce qui se traduit par une très grande différence au niveau des vitesses des dislocations pour une même contrainte. A titre d'exemple, à proximité de τ_o , une vis de longueur d'un micron avance à une vitesse supersonique de 150.000 ms⁻¹ dans le code de Naamane, contre 20 ms⁻¹ dans celui de Chaussidon.

3.6.2.3 Discussion

Dans ces deux modèles, le terme pré-exponentiel est donc proportionnel à L , ce qui devient irréaliste au fur et à mesure qu'on s'approche du régime athermique, tant en contrainte qu'en température. En effet, lorsqu'une de ces grandeurs est suffisamment élevée, la hauteur effective de la barrière devrait être nulle et le raisonnement probabilistique en termes de sites de nucléation n'a plus de raison d'être : les vis devraient ainsi retrouver une cinétique indépendante de leur longueur, comparable à celle des coins. Ces deux modèles ne permettent donc pas de décrire la transition vers le régime athermique.

Les choix de Naamane.

Dans ses simulations, Naamane fixe la contrainte appliquée à la valeur nécessaire pour obtenir des vitesses de dislocations vis de l'ordre de 1 $\mu\text{m/s}$, pour laquelle elle a ajusté le facteur pré-exponentiel H . De ce fait, du moment que la contrainte interne reste faible par rapport à la contrainte appliquée, elle se maintient toujours loin du régime de fortes contraintes. Par ailleurs, afin d'obtenir une mobilité similaire pour les vis et les coins à haute température, elle considère une vitesse v_{coin} proportionnelle à v_{vis} par l'intermédiaire d'un facteur K dont la dépendance en température est donnée dans le Tableau III-13.

T(K)	K(T)
50	1000000
100	10000
150	1000
200	200
250	50

Tableau III-13 : Valeurs du facteur de proportionnalité entre v_{vis} et v_{coin} , K , pour les cinq températures simulées par Naamane dans ses travaux de thèse (2008)

Notons toutefois que :

- Le choix de H limite la validité rigoureuse de sa loi à la contrainte qui assure la vitesse de déformation (et donc des dislocations) visée.
- Le choix de K garanti en même temps la diminution de v_{coin} avec la contrainte, et la transition entre les régimes thermique ($v_{vis} \ll v_{coin}$) et athermique ($v_{vis} \approx v_{coin}$), mais il reste toutefois arbitraire. Par ailleurs, ce procédé introduit une activation thermique pour la vitesse des dislocations coins avec une loi exponentielle, ce qui n'est pas réaliste lorsqu'on considère la réponse du système à une variation de contrainte. La même remarque peut se faire pour les dislocations vis à haute température (250K).
- Les vitesses des dislocations ainsi obtenues à haute température ($v \approx \mu\text{m/s}$) sont très inférieures à celles qui résultent de l'emploi des lois visqueuses ($v \approx \text{m/s}$) pour les simulations dans les matériaux CFC ou dans le fer CC à haute température (Queyreau, 2008).

Les choix de Chaussidon

Dans ses simulations, Chaussidon utilise la loi visqueuse pour les dislocations coins [§2], qui avancent donc toujours à des vitesses de plusieurs mètres par seconde. En augmentant la contrainte, la vitesse des vis devrait atteindre ce même niveau, ce qui compte tenu de la proportionnalité en L n'est possible que pour la dislocation la plus grande de la simulation. Pour assurer la continuité de sa loi, Chaussidon procède donc à une brusque accélération des dislocations plus petites entre $\tau_o - \varepsilon$ et τ_o (ε étant de l'ordre de 5MPa) afin de toutes les relier à forte contrainte pour que $v_{vis}(\tau_o)$ soit égale à $v_{coin}(\tau_o)$ [Fig. III-30], ce qui n'est pas satisfaisant.

En ce qui concerne l'influence de la température sur la vitesse des vis seul le facteur $k_B T$ dans l'exponentiel varie, ce qui, comme on le verra dans le Chapitre V, ne suffit pas à réaliser la transition à haute température dans laquelle on devrait avoir $v_{vis} \approx v_{coin}$ à partir de contraintes de l'ordre de quelques MPa seulement.

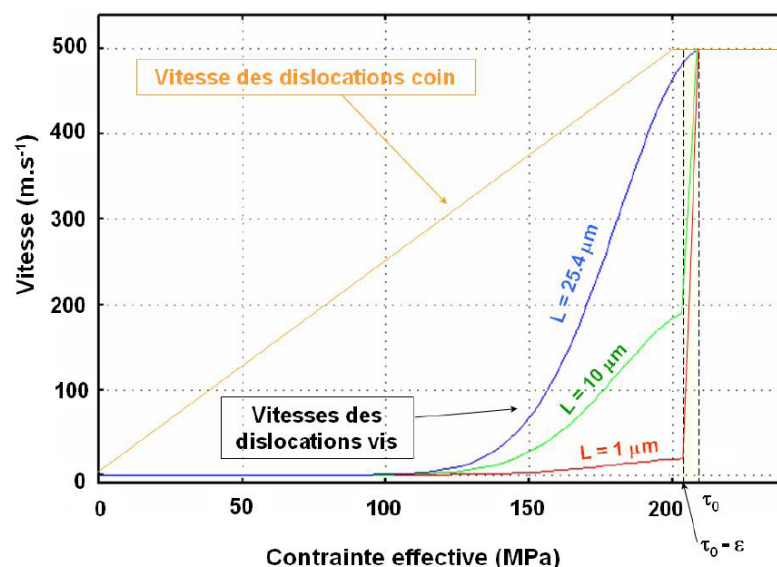


Fig. III-30 : Dépendance en contrainte de la vitesse des dislocations dans le modèle de Chaussidon [2007]

3.6.2.4 Comparaison avec le modèle de Hirth et Lothe

Alors que Chaussidon et Naamane (2008) utilisent un terme pré-exponentiel constant ajusté suivant différents critères [Tableau III-12], il dépend dans le modèle de H&L [§3.2.3] de la contrainte (voir de la température dans l'analyse à forte τ/T) via la longueur critique des doubles décrochements (l_c et l'). La Fig. III-31 montre l'évolution du terme pré-exponentiel dans l'analyse de H&L dans le cas $L \gg X$ [§3.2.3.2, eq.(3.41)]. On observe des valeurs du même ordre de grandeur que ceux de Chaussidon pour des dislocations de l'ordre du micron, mais avec la variation presque linéaire avec la contrainte induite par l_c .

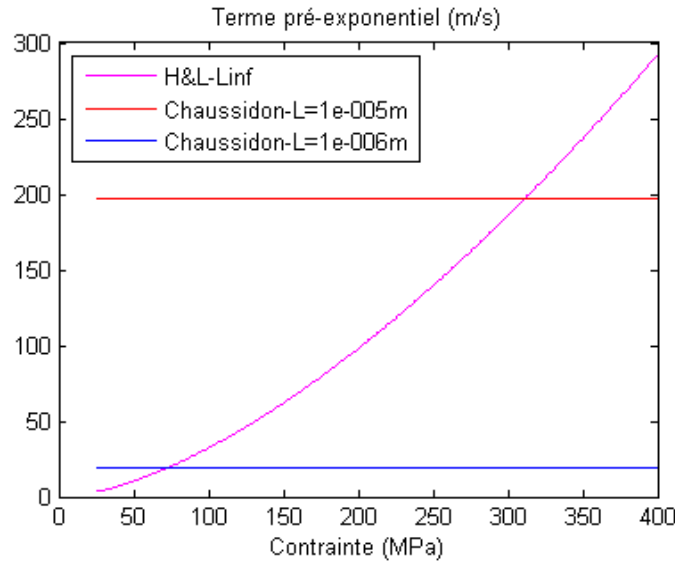


Fig. III-31 : Terme pré-exponentiel dans les modèles de Chaussidon ($L = 1$ et $10 \mu\text{m}$) et H&L ($L \rightarrow \infty$)

Par ailleurs, on considère que théoriquement la vitesse des vis (et donc le terme pré-exponentiel) devrait tendre vers celle des coins lorsque τ tend vers τ_0 . Ceci est impossible avec un terme pré-exponentiel constant, mais peut être vérifié analytiquement pour le modèle de H&L dans le cas le plus simple [eq.(3.41)]. Pour ce faire, on s'appuiera sur les points suivants :

- Les décrochements se déplacent à une vitesse similaire à celle des dislocations coin.
- La largeur critique d'un dd (l_c) tend vers b lorsque τ tend vers τ_0
- L'énergie d'activation tend vers 0 lorsque τ tend vers τ_0
- La correction de Seeger et Schiller pour le fer [λ_s , eq.(3.35)] varie entre 1 et 10 pour des contraintes et températures réalistes.

On peut alors écrire la vitesse des dislocations vis dans le régime athermique comme :

$$v_{vis}^{ath} = v_{vis} \Big|_{\tau \rightarrow \tau_0} = hX_{\infty}J \Big|_{\tau \rightarrow \tau_0} = v_d \frac{2}{\lambda^{1/2}} \frac{h}{l_c} \cdot \exp \left(- \frac{\Delta G}{2k_B T} \right) \Big|_{\tau \rightarrow \tau_0} \approx v_d \approx v_{coin} \quad (3.89)$$

3.6.3 L'énergie d'activation thermique

3.6.3.1 Introduction

Tant les travaux de Chaussidon comme ceux de Naamane utilisent l'approche d'ajustement empirique en utilisant une loi de Kocks [cf. eq.(3.76)] dont les paramètres sont ajustés à partir de mesures de la variation de la limite élastique avec la température [§3.2.4.5]. La différence entre les travaux de Chaussidon et Naamane ne porte en définitive que sur le choix de la courbe expérimentale $\tau_y(T)$ utilisée pour l'ajustement de $\Delta G(\tau)$:

- Chaussidon utilise la limite d'élasticité macroscopique (σ_y) de l'acier de cuve 16MND5.
- Naamane utilise la cisssion résolue en fin de stade 0 ($\neq \tau_{0,2\%}$ classique) mesurée sur des monocristaux de Fe.

Par ailleurs, la valeur de la constante de proportionnalité C entre ΔH et T , que l'on estime expérimentalement à partir des sauts de vitesse et température en utilisant l'expression (3.75), varie pour chaque matériau. Dans le cas de Chaussidon elle a été déterminée à partir des essais sur l'acier de cuve de Libert (2007), tandis que Naamane s'est servie des valeurs de C publiées dans la littérature (Schoeck, 1979, Spitzig, 1973).

Ce choix différent au niveau du matériau conduit à des valeurs des paramètres de la loi de Kocks (3.76) bien distincts [Tableau III-14], bien que leur méthodologie soit identique. Pour référence, notons toutefois que la démarche de Chaussidon comporte une erreur. En effet, il applique aux valeurs macroscopiques la correction de Taylor (traduisant la désorientation des grains dans un polycristal) en plus du facteur de Schmidt (traduisant la désorientation du plan de glissement dans un essai de traction). Cette redondance aboutit à une valeur de τ_0 significativement inférieure (-42%) à celle des monocristaux de fer.

Parallèlement, en partant des mêmes données brutes que Chaussidon, Libert (2007) a ajusté une expression similaire à partir d'un modèle d'agrégats polycristallins [Tableau III-14].

	C	τ_0 (MPa)	ΔH_0 (eV)	p	q
Chaussidon (2007)	39.73	210	0.93	0.52	1.80
Libert (2007)	34	498	0.77	0.335	1.12
Naamane (2008)	25	363	0.84	0.5	1

Tableau III-14 : Paramètres d'ajustement de la Loi de Kocks dans Chaussidon (2007), Libert (2007) et Naamane (2008)

3.6.3.2 Discussion

Les modèles de Naamane et Chaussidon étant similaires, nous discutons ici de l'intérêt pour notre étude d'utiliser l'énergie d'activation de l'acier de cuve ou celle du monocristal de fer.

A l'échelle de la DD, l'acier de cuve est modélisé comme une latte de ferrite (Chaussidon, 2007, Naamane, 2008), les particularités de ce matériau étant prises en compte par les conditions de la simulation : la géométrie de la latte, les obstacles considérés, les conditions de sollicitation, *etc.* Il semble donc raisonnable de choisir une loi de mobilité des dislocations dans la latte similaire à celle du monocristal (Naamane, 2008).

3.6.3.3 Comparaison avec les modèles théoriques de doubles décrochements

Nous analysons ici les différents ajustements expérimentaux des paramètres de la loi de Kocks afin de les comparer aux prédictions des modèles théoriques. Le Tableau III-15 rassemble les valeurs de ΔH_0 et τ_0 recueillis dans la bibliographie sur les monocristaux de fer (Naamane, 2008), ainsi que ceux obtenus par Chaussidon et Libert (2007) sur de l'acier de cuve 16MND5.

	τ_o (Mpa)	ΔH_o (eV)	Écart par rapport à Naamane	
			τ_o	ΔH_v
Chaussidon* (2007)	210	0,93	- 40%	+13 %
Naamane (2008)	363	0,84	----	----
Keh & Nakada (1967, 1968)	290	0,67	-20 %	-20 %
Smidt (1969)	330	0,84	-9 %	0 %
Spitzig & Keh (1970b)	370	0,7	2 %	-17 %
Spitzig(1973)	350 - 370	0,78 – 0,84	-4 % 2 %	-7 % 0 %
Kuramoto (1979)	360	----	-1 %	----
Libert* (2007)	498	0,77	+37 %	-10 %

Tableau III-15 : Comparaison des valeurs de τ_o et ΔH_o de Chaussidon (2007), Naamane (2008), Libert (2007) avec la littérature. Les valeurs de Chaussidon et Libert ont été obtenues pour de l'acier de cuve 16MND5

Concernant les paramètres p et q , Naamane montre que son choix ($p = 0,5$ et $q = 1$, dont la forme est montrée dans le Tableau III-10) traduit une dépendance en contrainte ($1 - \sqrt{\tau^* / \tau_o}$) qualitativement proche de celle prédite par le modèle théorique de Dorn et Rajnak [§3.2.4.3] en unités adimensionnelles [$\Delta H / \Delta H_o$, (τ^* / τ_o)].

Quant au modèle de H&L analysé précédemment [§3.2.4.3, eq.(3.56)], il présente lui aussi cette même dépendance. En effet, on peut réécrire l'équation (3.56) de façon à retrouver des paramètres d'une loi de Kocks. On obtient alors :

$$\Delta G = 2U_d - \sqrt{\frac{\mu \tau^* b^3 h^3}{2\pi}} = 2U_d \cdot \left[1 - \sqrt{\frac{\mu b^3 h^3}{2\pi (2U_d)^2} \tau^*} \right] = \Delta H_o \cdot \left[1 - \sqrt{\frac{\tau^*}{\tau_o}} \right] \quad (3.90)$$

Où l'on peut identifier les valeurs de ΔH et τ_o comme :

$$\Delta H_o = 2U_d \quad (3.91)$$

$$\tau_o = \frac{2\pi (2U_d)^2}{\mu b^3 h^3} = \frac{2\pi}{\mu b^3 h^3} \cdot \Delta H_o^2 \quad (3.92)$$

On remarquera donc que dans le modèle de H&L (3.92) la valeur de τ_o dépend de ΔH_o . L'application numérique des équations (3.91) et (3.92) nécessite donc une estimation de l'énergie de formation d'un décrochement (U_d). Tout en signalant les incertitudes liées à ce calcul [H&L p241], H&L montrent qu'elle peut s'écrire à partir du potentiel de Peierls [H&L Eq8.72] comme :

$$F_k = \frac{2b}{\pi} (2W_p W_o)^{1/2} \quad (3.93)$$

Où :

$$- W_p \approx \frac{b^2}{2\pi} \tau_p \text{ est l'énergie de Peierls [H\&L Eq8.42],} \quad (3.94)$$

$$- W_o \approx \mu b^2 \text{ est l'énergie de ligne de la dislocation.} \quad (3.95)$$

Dans son analyse du modèle de H&L Naamane obtient $\tau_o = 85\text{MPa}$, ce qui implique une valeur précise de ΔH_o ($\sim 0,1\text{eV}$) [Tableau III-16] qui est faible au regard des données bibliographiques [Tableau III-15]. De fait, en partant d'une valeur de τ_p obtenue par des calculs *ab-initio* ($\tau_p = 1,1\text{GPa}$) (Shimizu *et al.*, 2007), l'équation (3.93) donne $2U_d = 0,7\text{ eV}$, ce qui est très proche des valeurs expérimentales [Tableau III-15].

Le Tableau III-16 et la Fig. III-32 ci-dessous, illustrent toutefois les limites du modèle de H&L pour l'énergie d'activation thermique, dont l'expression n'est valable qu'aux faibles contraintes [eq. (3.31) ou §3.2.4.4]

	ΔH_o (eV)	τ_o (MPa)	T_{at} (K)
H&L (valeurs de Naamane)	0,107	85	51
H&L (pour τ_o raisonnable)	0,22	360	104
H&L (valeur de τ_p ab-initio)	0,7	3633	326
Naamane	0,84	5232	391

Tableau III-16 : Valeurs de τ_o et T_{at} pour différentes hauteurs de barrière de Peierls dans le modèle H&L.

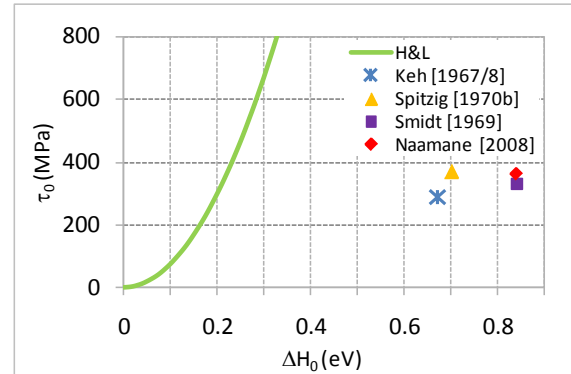


Fig. III-32 : Évolution de τ_o avec ΔH_o dans le modèle H&L

Dans la Fig. III-32 nous montrons la dépendance de τ_o en fonction de ΔH_o (3.92), et comment il n'est pas possible de la concilier avec les mesures expérimentales du Tableau III-15.

Dans le Tableau III-16, nous signalons le même point en termes de la contrainte (τ_o) et de la température (T_{at}) athermiques. Cette dernière est associée à ΔH_o de la forme :

$$T_{at} = \frac{\Delta H_o}{Ck_B} \quad (3.96)$$

où la constante C est celle de l'équation (3.74) [§3.2.4.5].

On constate que :

- en utilisant une hauteur de barrière réaliste (0,7eV) la température athermique (T_{at}) est donc raisonnable, mais la contrainte critique est trop importante (> 2GPa).
- pour obtenir des contraintes critiques similaires à l'expérience il faut des barrières trop faibles, ce qui conduit à des températures critiques aussi trop faibles.

Ces résultats ne sont pas surprenants au regard de la condition de validité du modèle : $\tau < \tau_p / 2\pi$ [cf. eq.(3.31)]. En effet, si l'on reprend la valeur de τ_p établie par Shimizu *et al.* (2007) pour le fer CC ($\sim 1,1$ GPa), on constate que dans notre cas le modèle de H&L n'est valable que jusqu'à $\tau \sim 110 - 175$ MPa. A partir de cette contrainte, la modélisation des doubles décrochements de H&L n'est plus réaliste [Fig. III-13], et d'autres modèles comme celui proposé par Dorn et Rajnak [§3.2.4.2] ou Caillard [§3.3] devraient être utilisés.

L'étude du modèle de Hirth et Lothe n'a cependant pas été stérile, puisque qu'il n'utilise pas de paramètres ajustées, il est raisonnable à faible contrainte, permet de corriger certaines pathologies des modèles de Chaussidon et Naamane, et a permis de dégager des points importants à tenir en compte dans la recherche d'une expression physiquement acceptable pour mobilité des vis dans les matériaux CC.

On retiendra donc l'analyse du terme pré-exponentiel de Hirth et Lothe pour essayer de décrire la transition dans le régime athermique à forte contrainte dans le Chapitre V.

3.6.4 La dérive à haute température

Si l'on revient à la formulation utilisée pour les deux modèles (3.18), on constate que pour une fréquence de nucléation de double décrochements constante, la vitesse à haute température n'est jamais nulle, même sans contrainte appliquée. Cette incohérence physique fût remarquée dès les premières études sur ce sujet (Schoeck, 1965, Kocks *et al.*, 1975e, Teodosiu and Sidoroff, 1976, Poirier, 1976), et résolue en tenant compte de la probabilité non nulle d'avoir des sauts en arrière lorsque la contrainte est très faible. Naamane écrit ainsi la vitesse de la dislocation vis comme :

$$v_{vis} = bh = b \cdot (h^p - h^n) \quad (3.97)$$

Où h^p (respectivement h^n) est la fréquence de sauts dans le sens de (respectivement opposé à) la contrainte.

Cette démarche aboutit à une formule analytique en $\sinh$, qui a la vertu mathématique de s'annuler lorsque $T \rightarrow \infty$, et qui dans le cas de Naamane (2008) s'écrit de la forme suivante :

$$v_{vis} \sim \exp\left(\frac{-\Delta H_0}{k_B T} \cdot \left[1 - \sqrt{\frac{\tau^*}{\tau_p}}\right]\right) = \exp\left(\frac{-\Delta H_0}{k_B T}\right) \exp\left(\frac{\Delta H_0}{k_B T} \sqrt{\frac{\tau^*}{\tau_p}}\right) \rightarrow 2 \exp\left(\frac{-\Delta H_0}{k_B T}\right) \sinh\left(\frac{\Delta H_0}{k_B T} \sqrt{\frac{\tau^*}{\tau_p}}\right) \quad (3.98)$$

Cependant, aussi juste que cette expression puisse être sous certaines conditions (Kocks *et al.*, 1975e), on remarquera qu'elle n'apporte pas de correction significative de v_{vis} pour le rang de température et contrainte étudié en dynamique de dislocations [Fig. III-33]

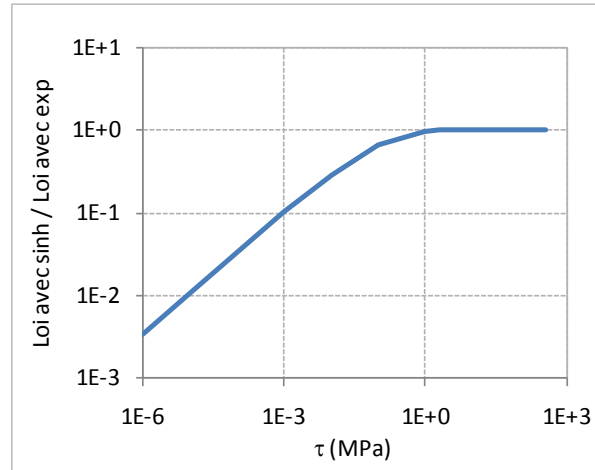


Fig. III-33 : Dépendance en contrainte du ratio entre la loi de Naamane (2008) utilisant l'expression en sinus hyperbolique et celle utilisant l'expression avec l'exponentielle pour une température de 300K. On observe que même à cette température les deux sont de fait identiques dès qu'on s'approche d'une contrainte de 1MPa.

Par ailleurs, il convient de noter ici que l'incohérence physique à contrainte nulle ne pose pas de problème si l'on utilise une longueur critique des décrochements qui dépend de la contrainte comme dans le modèle de Hirth et Lothe [§3.2.3.1]. Dans ce cas, la dépendance en contrainte du terme de nucléation l'emporte face à l'exponentielle dès lors qu'on est à une température suffisamment haute et une contrainte suffisamment basse (Kocks *et al.*, 1975e). De fait, la contrainte apparaît alors comme un facteur dans le terme pré-exponentiel, ce qui annule la vitesse pour une contrainte nulle indépendamment des considérations sur l'activation thermique. Physiquement, lorsque la contrainte tend vers zéro un dd aurait besoin d'une longueur critique infinie pour être stable, et donc sa formation est impossible (puisque la probabilité de sauts en arrière égale celle des sauts en avant) et la vitesse de la dislocation est nulle.

Pour la suite de notre étude **nous ne retiendrons donc pas cette correction.**

4 Conclusion

Dans ce chapitre nous avons passé en revue l'état de l'art sur la mobilité des dislocations dans le fer cubique centré (CC), à la base de l'alliage bainitique que nous voulons étudier à terme [§II]. Ces lois de mobilité constituent par ailleurs une des entrées de base pour tout code de dynamique des dislocations (DD). Nous avons ainsi distingué **deux régimes bien distincts** :

- Un régime dit athermique ou dynamique, dans lequel la vitesse des dislocations est proportionnelle à la contrainte selon une loi de type visqueux, dont le coefficient est noté B [§-]
- Un régime dit thermique, dans lequel les dislocations doivent vaincre un potentiel de Peierls non négligeable, ce qui résulte dans une expression de leur vitesse qui varie de forme exponentielle avec la contrainte selon une loi de type Arrhenius [§3].

Le régime athermique peut être atteint dès les très faibles contraintes et températures pour les dislocations coin, mais nécessite un apport énergétique supérieur pour les dislocations vis. Nous avons ici montré que, si les mécanismes de phonons dus à l'anharmonicité des cristaux (notamment le « vent de phonons ») permettent d'expliquer les mesures de B dans les matériaux CFC [§2.3], ceci n'est pas le **cas du fer CC** [§2.4]. Ainsi, les résultats expérimentaux d'Urabe et Weertman (1975) montrent une friction plus d'un ordre de grandeur supérieure à celle observée dans le cuivre :

- Pour les dislocations **vis** [§2.4.1], un modèle théorique à partir de la diffusion Raman et la friction radiative réussit à reproduire les observations.
- Pour les dislocations **coins** [§2.4.2], nous pensons que des mécanismes non pris en compte ici tels que l'influence des impuretés sont à l'origine de cette augmentation.

En ce qui concerne le code Tridis BCC, nous avons retenue la valeur de B_{coin} mesurée expérimentalement par Urabe et Weertman à température ambiante, soit $34 \cdot 10^{-5} \text{ Pa.s}$ [§2.5]. Celui-ci reste toutefois un paramètre d'entrée au code réglable dans chaque simulation.

Le régime thermique est caractéristique de la mobilité des dislocations vis à basse température ($T < 300\text{K}$) pour les vitesses de déformation usuelles lors des essais de traction. Dans ce régime, les dislocations vis n'ont pas suffisamment d'énergie comme pour franchir le Potentiel de Peierls de façon dynamique [§3.1], et nécessitent une activation thermique pour avancer. **Le modèle** le plus utilisé pour décrire ce mouvement dans le cadre du formalisme de Peierls-Nabarro est celui **des doubles décrochements** [§3.2], dont nous avons décrit en détail deux versions : « le modèle vibrationnel de Guyot et Dorn » (G&D) [§3.2.2], et « le modèle de diffusion de Hirth et Lothe » (H&L) [§3.2.3]. Jusqu'à présent, de part sa facilité de compréhension et de mise en œuvre, seul le modèle de G&D a été utilisé en DD [§3.6]. Nous avons vu cependant que le modèle de H&L a certaines caractéristiques intéressantes que nous exploiterons dans le Chapitre V, puisqu'il permet de traduire le passage dans le régime athermique à forte contrainte [3.6.2.4].

En dehors du modèle des doubles décrochements en soit, l'expression de **l'énergie d'activation thermique** qui sert de base à tous ces formalismes reste un point très débattu [§3.2.4, §3.6.3]. Nous avons répertorié les modèles et déterminations expérimentales dont on a connaissance, mais jusqu'à présent aucun ne semble satisfaisant [§3.5]. Dans ce sens, Caillard a proposé récemment **le mécanisme de « locking-unlocking »** [§3.3] qui pourrait, avec celui des doubles décrochements, répondre à certaines observations expérimentales. La validité de ce modèle reste cependant une question ouverte, puisque le mécanisme de transformation du cœur de la dislocation vis n'a pas pu être observé jusqu'à présent.

Dans tous les cas, la température d'intérêt pour l'étude de la fragilisation de l'acier de cuve avec l'irradiation se trouve dans **le domaine de transition** entre les régimes thermique et athermique énoncés, d'où l'intérêt que nous porterons à relier ces deux régimes ensemble dans la suite de ces travaux.

5 Références

- ACKLAND, G. J., BACON, D. J., CALDER, A. F. & HARRY, T. 1997. Computer simulation of point defect properties in dilute Fe-Cu alloy using a many-body interatomic potential. *Philosophical Magazine a-Physics of Condensed Matter Structure Defects and Mechanical Properties*, 75, 713-732.
- ACKLAND, G. J., MENDELEV, M. I., SROLOVITZ, D. J., HAN, S. & BARASHEV, A. V. 2004. Development of an interatomic potential for phosphorus impurities in alpha-iron. *Journal of Physics-Condensed Matter*, 16, S2629-S2642.
- ALSHITS, V. I. 1970. PHONON-WIND AND DISLOCATION DAMPING. *Soviet Physics Solid State, Ussr*, 11, 1947-&.
- ALSHITS, V. I. & INDENBOM, V. L. 1986. Mechanisms of Dislocation Drag. In: NABARRO, F. R. N. (ed.) *Dislocations in solids. Volume 7*. Amsterdam ; Oxford: North-Holland.
- ALSHITS, V. I. & MALSHUKO, A. G. 1972. PHONON COMPONENT OF DYNAMIC DRAG OF DISLOCATIONS. *Zhurnal Eksperimentalnoi I Teoreticheskoi Fiziki*, 63, 1849-&.
- ALSHITS, V. I. & SANDLER, Y. M. 1974. FLUTTER MECHANISM OF DISLOCATION DRAG. *Physica Status Solidi B-Basic Research*, 64, K45-K49.
- ANDRONOV, V. M., PETCHENKO, A. M. & STARTSEV, V. I. 1975. TEMPERATURE-DEPENDENCE OF DISLOCATION DRAG CONSTANT IN POTASSIUM-CHLORIDE AT TEMPERATURES FROM 77 DEGREES TO 413 DEGREES K. *Soviet Physics Acoustics-Ussr*, 21, 314-317.
- ATKINSON, W. & CABRERA, N. 1965. MOTION OF A FRENKEL-KONTOROWA DISLOCATION IN A 1-DIMENSIONAL CRYSTAL. *Physical Review*, 138, A763-&.
- BRAILSFORD, A. D. 1970. PHONON COMPONENT OF DISLOCATION DRAG. *Journal of Applied Physics*, 41, 4439-&.
- BRUNNER, D. & DIEHL, J. 1997. The effect of atomic lattice defects on the softening phenomena of high-purity alpha-iron. *Physica Status Solidi A*, 160, 355-372.
- CAILLARD, D. & COURET, A. 2002. Dislocation movements controlled by friction forces and local pinning in metals and alloys. *Materials Science and Engineering a-Structural Materials Properties Microstructure and Processing*, 322, 108-117.
- CAILLARD, D. & MARTIN, J. L. 2003a. Dislocation core structures and Peierls potentials. *Thermally activated mechanisms in crystal plasticity*. Oxford: Pergamon.
- CAILLARD, D. & MARTIN, J. L. 2003b. Kink-pair mechanism. *Thermally activated mechanisms in crystal plasticity*. Oxford: Pergamon.
- CAILLARD, D. & MARTIN, J. L. 2003c. Low temperature plasticity of BCC metals. *Thermally activated mechanisms in crystal plasticity*. Oxford: Pergamon.
- CAILLARD, D. & MARTIN, J. L. 2003d. Thermally activated core transformations. *Thermally activated mechanisms in crystal plasticity*. Oxford: Pergamon.
- CAILLARD, D. & MARTIN, J. L. 2003e. *Thermally activated mechanisms in crystal plasticity*, Oxford, Pergamon.
- CHAUSSIDON, J. 2007. *Etude multiéchelle de la plasticité du fer alpha à basse température*. Doctorat de l'INP Grenoble Thesis (PH D), Grenoble INP - ED "Matériaux et Génie des Procédés".
- CHAUSSIDON, J., FIVEL, M. & RODNEY, D. Year. The glide of screw dislocations in bcc Fe: Atomistic static and dynamic simulations. In, 2006. Pergamon-Elsevier Science Ltd, 3407-3416.
- CLOUET, E., VENTELON, L. & WILLAIME, F. 2009. Dislocation Core Energies and Core Fields from First Principles. *Physical Review Letters*, 102, 4.
- CONRAD, H., HAYS, L., SCHOECK, G. & WIEDERSICH, H. 1961. ON THE RATE-CONTROLLING MECHANISM FOR PLASTIC FLOW OF MG CRYSTALS AT LOW TEMPERATURES. *Acta Metallurgica*, 9, 367-378.
- COULON, G., LECOQ, J. & ESCAIG, B. 1974. X-RAY DISLOCATION SUBSTRUCTURE OBSERVATIONS AND STRENGTHENING MECHANISMS IN ALPHA-IRON SINGLE-CRYSTAL BETWEEN ROOM-TEMPERATURE AND 123 K. *Journal De Physique*, 35, 557-569.
- COURET, A. & CAILLARD, D. 1989. PRISMATIC SLIP IN BERYLLIUM .1. THE CONTROLLING MECHANISM AT THE PEAK TEMPERATURE. *Philosophical Magazine a-Physics of Condensed Matter Structure Defects and Mechanical Properties*, 59, 783-800.

- DARINSKAYA, E. V., URUSOVSKAYA, A. A., ALSHITS, V. I., ALEKHIN, V. A. & SHEMYAKOVA, A. A. 1981. SOME PECULIARITIES OF DEFORMATION AT IMPULSIVE LOADING OF CSI CRYSTALS AND DYNAMICS OF INDIVIDUAL DISLOCATIONS. *Fizika Tverdogo Tela*, 23, 1751-1755.
- DORN, J. E. & RAJNAK, S. 1964. NUCLEATION OF KINK PAIRS + PEIERLS MECHANISM OF PLASTIC DEFORMATION. *Transactions of the Metallurgical Society of Aime*, 230, 1052-&.
- DUESBERRY, M. S. & HIRSCH, P. B. 1968. In: ROSENFELD, A. R., HAHN, G. T., BEMENT, A. L. & JAFFEE, R. I. (eds.) *Dislocation dynamics : [proceedings]*. New York ; London: McGraw-Hill.
- ESCAIG, B. 1968a. CROSS-SLIP OF SCREW DISLOCATIONS IN CUBIC STRUCTURE WITH CENTERED FACES. *Journal De Physique*, 29, 225-&.
- ESCAIG, B. 1968b. THERMAL ACTIVATION OF DEVIATIONS IN WEAK STRESSES IN BCC AND HCP STRUCTURES. *Physica Status Solidi*, 28, 463-&.
- ESHELBY, J. D. 1962. INTERACTION OF KINKS AND ELASTIC WAVES. *Proceedings of the Royal Society of London Series a-Mathematical and Physical Sciences*, 266, 222-&.
- FARENC, S., CAILLARD, D. & COURET, A. 1995. A NEW MODEL FOR THE PEAK OF ACTIVATION AREA OF ALPHA-TITANIUM. *Acta Metallurgica Et Materialia*, 43, 3669-3678.
- FEDER, J., RUSSELL, K. C., LOTHE, J. & POUND, G. M. 1966. HOMOGENEOUS NUCLEATION AND GROWTH OF DROPLETS IN VAPOURS. *Advances in Physics*, 15, 111-&.
- FLYTZANIS, N. & CELLI, V. 1972. MOTION OF A SCREW DISLOCATION IN A CRYSTAL AT FINITE TEMPERATURE. *Journal of Applied Physics*, 43, 3301-&.
- GORMAN, J. A., WOOD, D. S. & VREELAND, T. 1969. MOBILITY OF DISLOCATIONS IN ALUMINUM. *Journal of Applied Physics*, 40, 833-&.
- GROH, P. & CONTE, R. 1971. STRESS RELAXATION AND CREEP IN ALPHA-IRON FILAMENTARY SINGLE CRYSTALS AT LOW TEMPERATURE. *Acta Metallurgica*, 19, 895-&.
- GUYOT, P. & DORN, J. E. 1967. A CRITICAL REVIEW OF PEIERLS MECHANISM. *Canadian Journal of Physics*, 45, 983-&.
- HEWAT, A. W. 1972. VIBRATIONAL AMPLITUDES AND DEBYE-WALLER FACTORS FROM ELASTIC-CONSTANTS AND RAMAN FREQUENCIES. *Journal of Physics Part C Solid State Physics*, 5, 1309-&.
- HIRSCH, P. B. Year. In: Fifth international conference on crystallography, 1960 Cambridge. Cambridge University Press, 139.
- HIRSCH, P. B. 1968. SOME ASPECTS OF DEFORMATION OF BODY-CENTERED CUBIC METALS. *Transactions of the Japan Institute of Metals*, S 9, R30-&.
- HIRTH, J. P. & LOTHE, J. 1982. Diffusive Glide and Climb Processes. *Theory of dislocations*. 2nd ed ed. New York ; Chichester: Wiley.
- JASSBY, K. M. & VREELAND, T. 1971. DISLOCATION MOBILITY IN COPPER AND ZINC AT 44 DEGREES K. *Scripta Metallurgica*, 5, 1007-&.
- KAGANOV, M. I., KRAVCHEN.VY & NATSIK, V. D. 1973. BRAKING OF DISLOCATIONS IN METALS BY ELECTRONS. *Uspekhi Fizicheskikh Nauk*, 111, 655-682.
- KEH, A. S. & NAKADA, Y. 1967. PLASTICITY OF IRON SINGLE CRYSTALS. *Canadian Journal of Physics*, 45, 1101-&.
- KEH, A. S. & NAKADA, Y. 1968. YIELDING PLASTIC FLOW AND DISLOCATION SUBSTRUCTURE IN IRON SINGLE CRYSTALS. *Transactions of the Japan Institute of Metals*, S 9, 876-&.
- KOBELEV, N. P., SOIFER, Y. N. & ALSHITS, V. I. 1979. RATIO BETWEEN VISCOSITY AND RELAXATION COMPONENTS OF DISLOCATION DAMPING OF ULTRASOUND IN COPPER. *Fizika Tverdogo Tela*, 21, 1172-1179.
- KOCKS, U. F., ARGON, A. S. & ASHBY, M. F. 1975c. The Energy to Nucleate a Continuous Bulge. *Thermodynamics and kinetics of slip*. Oxford: Pergamon Press.
- KOCKS, U. F., ARGON, A. S. & ASHBY, M. F. 1975e. Low Stresses and High Temperatures. *Thermodynamics and kinetics of slip*. Oxford: Pergamon Press.
- KOCKS, U. F., ARGON, A. S. & ASHBY, M. F. 1975f. Phenomenological Description of Glide Resistance Profiles. *Thermodynamics and kinetics of slip*. Oxford: Pergamon Press.

- KOSEVICH, A. M. & NATSIK, V. D. 1967. SLOWING DOWN OF DISLOCATIONS BY SCATTERING OF ELASTIC WAVES FROM IMPURITIES. *Soviet Physics JETP-USSR*, 24, 810-&.
- KURAMOTO, E., AONO, Y. & KITAJIMA, K. 1979. THERMALLY ACTIVATED SLIP DEFORMATION OF HIGH-PURITY IRON SINGLE-CRYSTALS BETWEEN 4.2-K AND 300-K. *Scripta Metallurgica*, 13, 1039-1042.
- LENZ, D. & LUCKE, K. 1969. TEMPERATURE AND FREQUENCY DEPENDENCE OF DISLOCATION DAMPING OF LEAD. *Zeitschrift Fur Metallkunde*, 60, 375-&.
- LIBERT, M. 2007. *Etudes expérimentale et numérique de l'effet des mécanismes de plasticité sur la rupture fragile par clivage dans les aciers faiblement alliés*. Doctorat de l'École Centrale de Paris Thesis (PH D), Ecole Centrale de Paris.
- LOTHE, J. 1960. ASPECTS OF THE THEORIES OF DISLOCATION MOBILITY AND INTERNAL FRICTION. *Physical Review*, 117, 704-708.
- LOTHE, J. 1962. THEORY DISLOCATION MOBILITY IN PURE SLIP. *Journal of Applied Physics*, 33, 2116-&.
- LOUCHET, F. 1976. *Plasticité des métaux de structure cubique centrée à basse température : déformation "in situ" par microscopie électronique à haute tension*. Doctorat Thesis (PH D), Université de Toulouse.
- MAHAPATRA, R., GIRSHICK, A., POPE, D. P. & VITEK, V. 1995. DEFORMATION MECHANISMS OF NEAR-STOICHIOMETRIC SINGLE-PHASE TIAL SINGLE-CRYSTALS - A COMBINED EXPERIMENTAL AND ATOMISTIC MODELING STUDY. *Scripta Metallurgica Et Materialia*, 33, 1921-1927.
- MARIAN, J., CAI, W. & BULATOV, V. V. 2004. Dynamic transitions from smooth to rough to twinning in dislocation motion. *Nature Materials*, 3, 158-163.
- MONNET, G. & TERYTYEV, D. 2009. Structure and mobility of the $1/2 \langle 111 \rangle \{112\}$ edge dislocation in BCC iron studied by molecular dynamics. *Acta Materialia*, 57, 1416-1426.
- NAAMANE, S. 2008. *Etude de la déformation plastique de la ferrite à basse température: simulations de dynamique des dislocations*. Doctorat de l'Université Pierre et Marie Curie Thesis (PH D), Université Pierre et Marie Curie.
- NABARRO, F. R. N. 1947. DISLOCATIONS IN A SIMPLE CUBIC LATTICE. *Proceedings of the Physical Society of London*, 59, 256-272.
- NABARRO, F. R. N. 1951. THE INTERACTION OF SCREW DISLOCATIONS AND SOUND WAVES. *Proceedings of the Royal Society of London Series A-Mathematical and Physical Sciences*, 209, 278-290.
- NINOMIYA, T. 1974. FRICTIONAL FORCE ACTING ON A DISLOCATION - FLUTTERING MECHANISM. *Journal of the Physical Society of Japan*, 36, 399-405.
- OBRTLICK, K., ROBERTSON, C. F. & MARINI, B. 2005. Dislocation structures in 16MND5 pressure vessel steel strained in uniaxial tension. *Journal of Nuclear Materials*, 342, 35-41.
- PAL-VAL, P. P., PLATKOV, V. Y. & STARTSEV, V. I. 1976. TEMPERATURE-DEPENDENCE OF DISLOCATION DRAG CONSTANT IN ANTIMONY. *Physica Status Solidi a-Applied Research*, 38, 383-391.
- PEIERLS, R. E. 1940. The size of a dislocation. *Proceedings of the Physical Society of London*, 52, 34-37.
- POIRIER, J.-P. 1976. *Plasticité à haute température des solides cristallins*, Paris, Eyrolles.
- QUESNEL, D. J., SATO, A. & MESHII, M. 1975. SOLUTION SOFTENING AND HARDENING IN IRON-CARBON SYSTEM. *Materials Science and Engineering*, 18, 199-208.
- QUEYREAU, S. 2008. *Étude des Mécanismes d'Écrouissage Sous Irradiation de la Ferrite par Simulations de Dynamique de Dislocations*. Doctorat de l'Université Pierre et Marie Curie Thesis (PH D), Université Pierre et Marie Curie.
- RAYNE, J. A. & CHANDRASEKHAR, B. S. 1961. ELASTIC CONSTANTS OF IRON FROM 4.2 TO 300DEGREESK. *Physical Review*, 122, 1714-&.
- ROBERTSON, C. F., OBRTLICK, K. & MARINI, B. 2007. Dislocation structures in 16MND5 pressure vessel steel strained in uniaxial tension at different temperatures from -196 degrees C up to 25 degrees C. *Journal of Nuclear Materials*, 366, 58-69.
- SAKA, H. & IMURA, T. 1973. MOBILITY OF DISLOCATIONS IN FE-3 PERCENT SI. *Physica Status Solidi a-Applied Research*, 19, 653-660.
- SCHOECK, G. 1965. ACTIVATION ENERGY OF DISLOCATION MOVEMENT. *Physica Status Solidi*, 8, 499-&.

- SCHOECK, G. 1979. Thermodynamics and thermal activation of dislocations. In: NABARRO, F. R. N. (ed.) *Dislocations in solids. Volume 2, Dislocations in crystals*. Amsterdam ; Oxford: North-Holland.
- SEEGER, A. 1984. In: VEYSSI RE, P., KUBIN, L. & CASTAING, J. (eds.) *Dislocations 1984 : comptes rendus du Colloque International du CNRS Dislocations : Structure de coeur et propriétés physiques = Core structure and physical properties*. Paris: Centre National de la Recherche Scientifique.
- SEEGER, A. & BUCK, O. 1960. DIE EXPERIMENTELLE ERMITTLUNG DER ELASTISCHEN KONSTANTEN HOHERER ORDNUNG. *Zeitschrift Fur Naturforschung Part a-Astrophysik Physik Und Physikalische Chemie*, 15, 1056-1067.
- SEEGER, A. & SCHILLER, P. 1962. BILDUNG UND DIFFUSION VON KINKEN ALS GRUNDPROZESS DER VERSETZUNGSBEWEGUNG BEI DER MESSUNG DER INNEREN REIBUNG. *Acta Metallurgica*, 10, 348-&.
- SEEGER, A. & WUTHRICH, C. 1976. DISLOCATION RELAXATION PROCESSES IN BODY-CENTERED CUBIC METALS. *Nuovo Cimento Della Societa Italiana Di Fisica B-General Physics Relativity Astronomy and Mathematical Physics and Methods*, 33, 38-75.
- SHIGESATO, G. 2007. *Development of dislocation structures in steels: Relation with the mechanical properties*. Doctorat de l'INP Grenoble Thesis (PH D), Grenoble INP - ED "Matériaux et Génie des Procédés".
- SHIMIZU, F., OGATA, S., YAMAGUCHI, M., KANO, T., KIMIZUKA, H., ITAKURA, M. & KABURAKI, H. 2007. First-principles Calculation on Core Structures and Peierls Stress of a Screw Dislocation in BCC Iron. In: KABURAKI, H. (ed.) *Annual Report of the Earth Simulator Center*. Japan Atomic Energy Agency.
- SIMMONS, J. P., RAO, S. I. & DIMIDUK, D. M. 1997. Atomistics simulations of structures and properties of $1/2 \langle 110 \rangle$ dislocations using three different embedded-atom method potentials fit to gamma-TiAl. *Philosophical Magazine a-Physics of Condensed Matter Structure Defects and Mechanical Properties*, 75, 1299-1328.
- SMIDT, F. A. 1969. AN ANALYSIS OF THERMALLY ACTIVATED FLOW IN ALPHA-IRON BASED ON T-TAU' CONSIDERATIONS. *Acta Metallurgica*, 17, 381-&.
- SPITZIG, W. A. 1973. EFFECTS OF ORIENTATION, TEMPERATURE AND STRAIN RATE ON DEFORMATION OF FE-0.16 WT PERCENT TI SINGLE-CRYSTALS. *Materials Science and Engineering*, 12, 191-202.
- SPITZIG, W. A. & KEH, A. S. 1970a. EFFECT OF ORIENTATION AND TEMPERATURE ON PLASTIC FLOW PROPERTIES OF IRON SINGLE CRYSTALS. *Acta Metallurgica*, 18, 611-&.
- SPITZIG, W. A. & KEH, A. S. 1970b. ORIENTATION DEPENDENCE OF STRAIN-RATE SENSITIVITY AND THERMALLY ACTIVATED FLOW IN IRON SINGLE CRYSTALS. *Acta Metallurgica*, 18, 1021-&.
- SUZUKI, T., TAKEUCHI, S. & YOSHINAGA, H. 1991. *Dislocation dynamics and plasticity*, Berlin ; London, Springer-Verlag.
- TAKEUCHI, S. 1981. In: LEE, J. K. (ed.) *Interatomic Potentials and Crystalline Defects*. Warrendale, PA: The Metallurgical Society of AIME.
- TANG, M., KUBIN, L. P. & CANOVA, G. R. 1998. Dislocation mobility and the mechanical response of BCC single crystals: A mesoscopic approach. *Acta Materialia*, 46, 3221-3235.
- TEODOSIU, C. & SIDOROFF, F. 1976. FINITE THEORY OF ELASTOVISCOPLASTICITY OF SINGLE-CRYSTALS. *International Journal of Engineering Science*, 14, 713-723.
- TERENTYEV, D., BACON, D. J. & OSETSKY, Y. N. 2008a. Interaction of an edge dislocation with voids in alpha-iron modelled with different interatomic potentials. *Journal of Physics-Condensed Matter*, 20, 11.
- URABE, N. & WEERTMAN, J. 1975. DISLOCATION MOBILITY IN POTASSIUM AND IRON SINGLE-CRYSTALS. *Materials Science and Engineering*, 18, 41-49.
- VITEK, V. 1966. THERMALLY ACTIVATED MOTION OF SCREW DISLOCATIONS IN BCC METALS. *Physica Status Solidi*, 18, 687-&.
- VITEK, V. & IGARASHI, M. 1991. CORE STRUCTURE OF $1/3(1120)$ SCREW DISLOCATIONS ON BASAL AND PRISMATIC PLANES IN HCP METALS - AN ATOMISTIC STUDY. *Philosophical Magazine*, 63, 1059-1075.
- WEINER, J. H. 1964. DISLOCATION VELOCITIES IN LINEAR CHAIN. *Physical Review a-General Physics*, 136, A863-&.

ZELDOVICH, J. B. 1943. On the theory of new phase formation: cavitation. *Acta Physicochim. URSS*, 18, 1-22.

Chapitre IV : Amélioration du code Tridis BCC

Table des matières

Chapitre IV : Amélioration du code Tridis BCC.....	87
1 Introduction.....	89
2 Amélioration de la gestion des segments de dislocation dans Tridis BCC.....	90
2.1 Introduction.....	90
2.2 Motivation : la simulation de référence.....	90
2.3 Systèmes de glissement considérés.....	92
2.4 Le glissement dévié dans Tridis BCC.....	93
2.4.1 Introduction.....	93
2.4.2 Vitesse des dislocations et probabilité de changement de plan.....	94
2.5 Interaction entre segments.....	95
2.5.1 Règles locales	95
2.5.1.1 Interactions dans le plan	95
2.5.1.2 Interactions entre systèmes déviés	96
2.5.2 Nouvelles règles d'interaction	98
2.5.2.1 Détection de segments obstacles entre systèmes déviés	98
2.5.2.2 L'algorithme de tri d'obstacles multiples	99
2.5.2.3 La gestion des segments répulsifs	100
2.6 La division des pas de temps entre segments vis et coin	101
2.7 Discussion	101
3 Amélioration des performances du code.....	103
3.1 Introduction	103
3.2 Utilisation de la librairie mathématique BLAS.....	103
3.2.1 Introduction.....	103
3.2.2 Cas des calculs avec des matrices 3x3	103
3.2.3 Cas des calculs avec des matrices carrées ($N \times N$) de dimensions variables	104
3.3 Une nouvelle méthode des boîtes	105
3.3.1 La méthode des boîtes originale à Tridis	106
3.3.2 Une reformulation de la méthode des boîtes	107
3.3.2.1 Présentation théorique	107
3.3.2.2 Application numérique	108
3.3.2.3 Analyse de l'erreur.	110
3.4 Le gain en performances.....	111
3.4.1 Introduction.....	111
3.4.2 Impact du « nettoyage » du code	111
3.4.3 Impact de la nouvelle méthode des boîtes.....	113
3.5 Discussion	115
4 Conclusion	116
5 Références.....	117

1 Introduction

Le code de dynamique des dislocations (DD) pour matériaux CC (Tridis-BCC v1.0) utilisé au départ de ces travaux a notamment été développé par Shigesato (2007) et Chaussidon (2007) lors de leurs thèses respectives. Ce code est une adaptation du code CFC en développement au sein du laboratoire SIMAP-GPM2 de l'INPG (Verdier *et al.*, 1998), né de la collaboration entre Kubin et Canova (Kubin *et al.*, 1992). Des détails sur la genèse et l'histoire des codes de dynamique de dislocations sont disponibles par exemple dans la thèse de Chaussidon (2007) ou encore dans le mémoire d'HDR de Fivel (2008).

Au cours des travaux ci-après, une partie importante du temps a été consacrée à une étude approfondie du code de calcul original, afin d'améliorer sa stabilité, sa rapidité, et de faciliter les différentes modifications que nous lui avons apportées ainsi que les futures évolutions.

Dans un premier temps, nous nous sommes concentrés sur une remise à niveau générale de Tridis-BCC v1.0 [§C], réalisée en parallèle à l'effort de compréhension personnel nécessaire à toute modification postérieure. Comme nous le verrons, ce « nettoyage » a eu comme conséquence inattendue un gain important en performances.

Dans ce chapitre, nous ne détaillerons pas toutes les modifications apportées (par ailleurs documentées dans le code), mais nous nous concentrerons sur celles qui concernent directement le mouvement des segments [§2], avec une attention toute particulière prêtée à la gestion du glissement dévié [§2.4]. Comme nous le verrons plus loin, cela a permis notamment de résoudre les problèmes d'instabilité [§2.2] rencontrés par Chaussidon lors de ses travaux de thèse.

Nous présenterons ensuite les travaux réalisés afin de diminuer le temps de calcul des simulations [§3], sans pour autant changer sa nature séquentielle (non « parallèle »). Nous avons travaillé deux aspects complémentaires :

- l'utilisation des bibliothèques BLAS (*Basic Linear Algebra Subprograms*), pour améliorer la performance des opérations entre vecteurs et matrices [§3.2].
- un nouvel algorithme pour le calcul des contraintes à longue portée [§3.3].

Notons par ailleurs que l'évolution du code tout au long de ces trois années a été réalisée en s'appuyant sur une plateforme CVS [*Concurrent Versions System* (Grune, 1986, Berliner, 1990)], sur laquelle toutes les modifications effectuées dans le code ont été progressivement incorporées avec un clair suivi des différentes versions, qui restent disponibles au CEA.

2 Amélioration de la gestion des segments de dislocation dans Tridis BCC

2.1 Introduction

En dehors de la mobilité thermiquement activée des dislocations vis [§III-3], une des particularités du fer CC par rapport au CFC est la facilité du glissement dévié, ou capacité des dislocations vis à changer de plan de glissement.

En dynamique des dislocations en 3D, l'introduction du glissement dévié ouvre la porte à toute une nouvelle famille d'interactions entre segments de différents systèmes de glissement à gérer. En ce qui concerne Tridis, ce type d'interactions a été introduit par Shin (2004) dans le code dédié aux matériaux CFC (Tridis 7.0) et la version CC (Tridis-BCC v1.0) ne comporte qu'une adaptation sommaire qui rend compte des systèmes de glissement propre à la cristallographie cubique centrée.

Or, on constate que lorsqu'on prend en compte à la fois la possibilité du glissement dévié, la très forte asymétrie de la mobilité des segments vis et coin et le schéma d'intégration explicite, il devient très difficile de stabiliser les simulations de DD. Cela est d'autant plus difficile en présence d'un chargement complexe tel que la flexion que nous utiliserons pour l'étude du comportement des lattes de la microstructure bainitique de l'acier de cuve.

Dans cette partie, nous présentons d'abord les problèmes d'instabilité ainsi que certains problèmes constatés dans la simulation que nous avons pris comme référence tout au long de cette thèse [§2.2], puis nous détaillerons les éléments de base du mouvement des segments de dislocations dans Tridis-BCC, dont les systèmes de glissement considérés dans la discrétisation vis-coin [§2.3], et l'implémentation du glissement dévié [§2.4]. Nous décrivons ensuite les améliorations apportées qui nous ont permis de stabiliser le code, dont les interactions entre segments de dislocation [§2.5] et la relaxation des segments coin [§2.6], que nous comparons à la version originale dans la dernière section [§2.7].

2.2 Motivation : la simulation de référence

Tout au long du travail de développement de Tridis BCC réalisé lors de cette thèse nous avons utilisé comme référence une des simulations complexes réalisées par Chaussidon (2007, 2010) pour analyser le clivage de l'acier de cuve à basse température. En voici quelques informations d'ordre général :

- Nous simulons une latte de ferrite de dimensions proches à celles observées dans l'acier de cuve bainitique [§II-4], soit $10 \times 10 \times 2 \mu\text{m}$.
- La température de l'essai est fixée à 200K.
- La sollicitation mécanique correspond à une flexion pure de la latte, avec un asservissement en vitesse de courbure imposée. Pour ce faire on pilote une composante du tenseur de Nye (1953), qui correspond à l'inverse du rayon de courbure de la latte dans le sens de la sollicitation (Chaussidon, 2007).
- La latte est supposée recouverte de carbures qui empêchent la propagation des dislocations dans les lattes voisines. Les segments sont donc confinés à l'intérieur du volume parallélépipédique simulé.
- Des sources de dislocations appartenant à deux systèmes de glissement différents (8 et 10 dans le Tableau IV-1) sont placées aux joints de latte. Ceci est simulé par l'existence d'un domaine virtuel autour de la latte, dont le but n'est que la nucléation des dislocations (ici seulement côté compression). Pour accélérer les simulations, la discrétisation des segments est plus grossière dans le domaine virtuel, le glissement dévié est inactivé, et les calculs de contrainte sont simplifiés en omettant la contrainte interne.

En ce qui concerne les aspects techniques, on notera :

- Le nombre de pas de calcul est de 4300, soit environ $4,3\mu s$ avec un pas de temps de 1ns.
- Le nombre de segments évolue au cours de la simulation entre 20 et 130.000.
- Les dislocations vis n'avancent qu'une fois tous les vingt pas de temps.
- Pour le calcul de la contrainte [voir §3.3.1] :
 - o Nous utilisons 10^3 boîtes, dont l'arête mesure 1000 unités de réseau, soit 5 fois la longueur de discrétisation choisie pour les dislocations vis.
 - o Nous considérons un domaine de courte portée limité aux 27 boîtes premières voisines ($n_{LayerSR} = 1$)
 - o Nous actualisons la contrainte à longue portée tous les 10 pas ($N_{updateLR} = 10$).

Le point de départ des développements présentés ici est l'analyse de la très forte et soudaine augmentation du nombre de segments de dislocation [Fig. IV-1a]. De fait, lors de la remise à niveau du code CC [§C], nous nous sommes aperçus que des modifications mineures et/ou corrections d'erreurs avaient un très fort impact sur l'instant de l'apparition de cette « explosion » de la microstructure [Fig. IV-1a]. La question s'est alors posée sur la nature physique ou numérique de cette caractéristique.

Lors de ces travaux, nous avons dans un premier temps ré-encodé le mouvement des segments pour diminuer le temps de calcul, mais sans modifier le déroulement de la simulation [§3.4.2]. Nous avons alors pu activer la vérification d'incompatibilités géométriques (recouvrement des segments), qui avait été désactivée dans le passage CFC $\rightarrow$ CC entre autre à cause du coût en temps de calcul [Fig. IV-1b]. Ceci nous a permis de mettre en évidence des lacunes dans la gestion des interactions entre segments de systèmes déviés propres à la version CC de Tridis [§2.5.2]. Comme nous le verrons par la suite, bien que l'apparition de ces erreurs soit toujours étroitement liée à l'explosion de la microstructure constatée [Fig. IV-1a], elle ne l'explique pas entièrement.

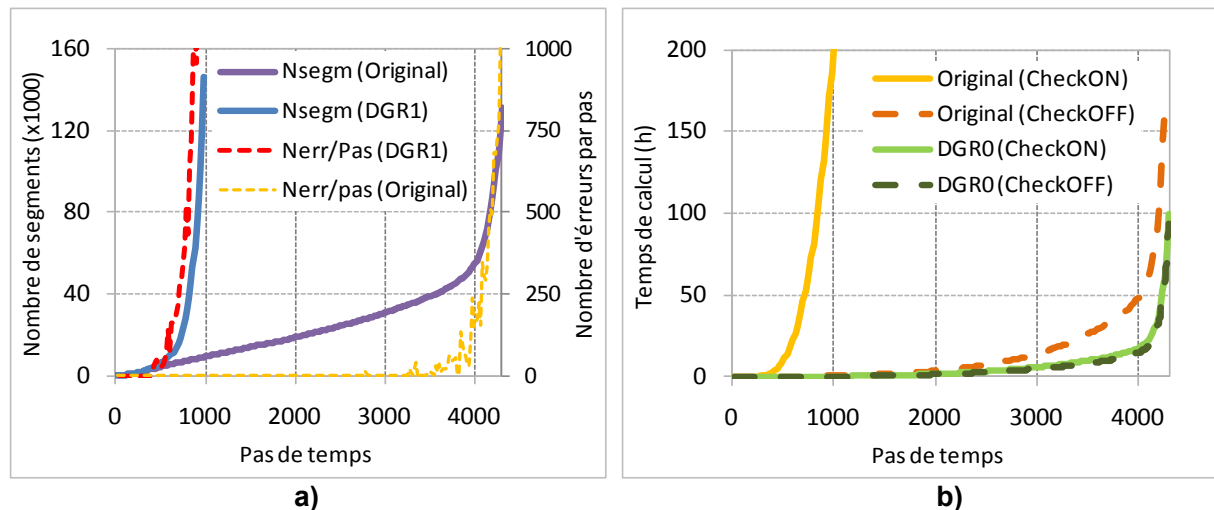


Fig. IV-1 : Analyse de la soudaine augmentation du nombre de segments dislocations dans la simulation de référence de Chaussidon [§3.4.2] : **a)** Corrélation entre l'évolution du nombre de segments et celle du nombre d'erreurs de recouvrement de segments par pas de calcul avec le code original, et avec la dernière version du code avant la modification du mouvement de segments (« DGR1 ») ; **b)** Évolution du temps de calcul dans la simulation avec (« CheckON ») et sans (« CheckOFF ») activer la détection d'erreurs de recouvrement de segments pour le code Tridis BCC original et la dernière version nettoyée qui assure l'identité segment à segment des simulations (« DGR0 »).

2.3 Systèmes de glissement considérés

Les premières simulations 3D en DD furent réalisées par Kubin *et al.* (1992). Depuis, d'autres versions de la DD en 3D ont vu le jour, la différence majeure entre elles étant la manière de discrétiser les lignes de dislocations. Dans le cas de Tridis qui découle directement des travaux originaux de Kubin *et al.*, il s'agit d'une discrétisation en segments vis et coin [Fig. IV-2a]. D'autres codes utilisent un plus grand nombre de directions de discrétisation des lignes comme par exemple microMégas, parent du code Tridis et actuellement développé à l'Onera par Devincré et Kubin et qui introduit la direction mixte à 60° [Fig. IV-2b]. Pour les codes plus récents (codes nodaux), les orientations des lignes sont quelconques puisqu'elles relient deux nœuds comme c'est le cas dans le code de (Weygand *et al.*, 2001) [Fig. IV-2c] ou encore dans ParaDIS développé par le *Lawrence Livermore National Laboratory*. C'est également cette structure nodale qui a été retenue récemment pour le nouveau code aNUMODIS développé en collaboration entre le CEA et le CNRS. Chacun de ces codes présente ses avantages et inconvénients, sur lesquels nous ne reviendrons pas ici, mais ils partagent tous la même idée de base.

Le Tableau IV-1 montre les vecteurs coin ($\langle 112 \rangle$) et vis ($\langle 111 \rangle$) utilisés pour discrétiser les dislocations sur chacun des douze systèmes de glissement considérés dans la version CC de Tridis (Shigesato, 2007). Chaque direction vis est ainsi associée à 3 directions coin. On définit ainsi les trois plans de glissement possibles pour une même dislocation vis, partageant donc le même vecteur de Burgers. Ces directions vis (vecteurs de Burgers) ont été choisies à partir du tétraèdre de Thompson adaptée pour la structure CC (Chaussidon, 2007). Par ailleurs, on ne considère ici que des dislocations parfaites, puisque dans le fer CC l'énergie de faute d'empilement est très importante et la séparation entre partielles est bien inférieure à la discrétisation spatiale choisie ($\times 1 = 10b$).

Système	1 (A3)	2 (A2)	3 (A6)	4 (B4)	5 (B2)	6 (B5)
Vis	[1-1-1]			[1 1 1]		
Coin	[1 2-1]	[2 1 1]	[1-1 2]	[-1 2-1]	[-2 1 1]	[-1-1 2]
Normal au plan	(1 0 1)	(0 -1 1)	(-1-1 0)	(-1 0 1)	(0-1 1)	(1-1 0)

Système	7 (C5)	8 (C3)	9 (C1)	10 (D6)	11 (D4)	12 (D1)
Vis	[-1-1 1]			[-1 1-1]		
Coin	[-1-1-2]	[1-2-1]	[2-1 1]	[1-1-2]	[-1-2-1]	[-2-1 1]
Normal au plan	(1-1 0)	(1 0 1)	(0 1 1)	(-1-1 0)	(-1 0 1)	(0 1 1)

Tableau IV-1 : Vecteurs de ligne et directions de glissement des segments des dislocations utilisées dans Tridis BCC. La dénomination de chaque système dans la notation de Schmid et Boas (1950) est notée entre parenthèses.

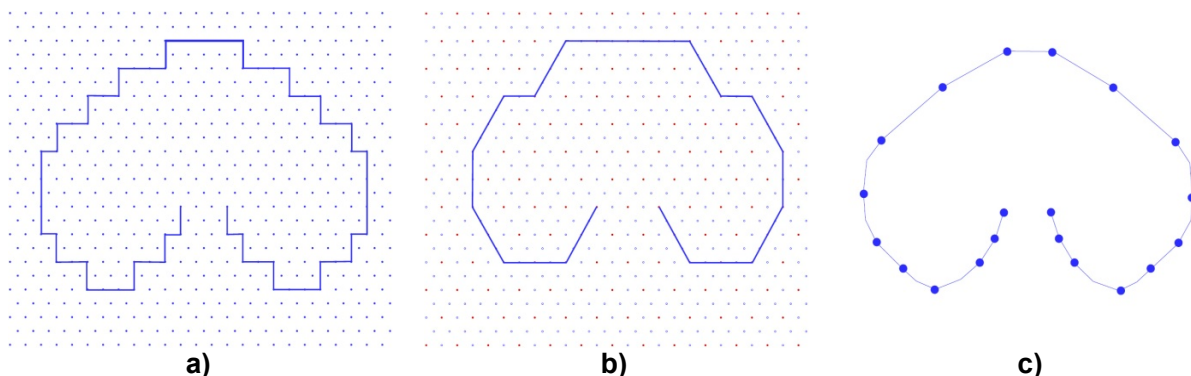


Fig. IV-2 : Discretisation d'une ligne de dislocation dans les modèles : a) vis-coin ; b) mixte pur, et c) nodal (Shin, 2004)

2.4 Le glissement dévié dans Tridis BCC

2.4.1 Introduction

Le glissement dévié dans le fer CC est favorisé d'une part par la structure de cœur compacte de ces dislocations (Mendelev *et al.*, 2003, Ackland *et al.*, 2004, Domain and Monnet, 2005, Chaussidon *et al.*, 2006), et d'autre part par la multiplicité de plans de déviés disponibles. Ce sujet a fait l'objet de très nombreuses études, afin de déterminer la nature des plans de glissement, qui dépendent de la température (Keh and Nakada, 1967, 1968, Spitzig and Keh, 1970a), de l'orientation des échantillons par rapport au chargement (Takeuchi *et al.*, 1967, Spitzig and Keh, 1970a), et la concentration d'impuretés (Stein, 1966, Spitzig, 1973, Quesnel *et al.*, 1975). Par la suite, nous nous concentrerons essentiellement à analyser la prise en compte du mécanisme de glissement dévié des dislocations vis dans Tridis BCC, en nous référant aux études bibliographiques de Chaussidon (2007) et Naamane (2008).

A l'instar des observations expérimentales (Caillard, 2009) et numériques (Marian *et al.*, 2004, Chaussidon *et al.*, 2006), on considère que la nucléation de doubles décrochements, et donc le glissement des dislocations vis dans la ferrite, ne peut s'effectuer que sur trois plans de type $\{110\}$ à 60° . Les glissements sur des plans de type $\{112\}$, voir des plans non cristallographiques, observés dans des traces des dislocations sur des monocristaux [Spitzig et Keh (1970a) sur le fer, et Christian (1983) sur des alliages CC de NbMo] sont attribuées à un glissement moyen résultat d'une composition de sauts élémentaires sur des plans $\{110\}$ voisins (Chaussidon, 2007).

A notre connaissance, trois études en dynamique de dislocations ont introduit le glissement dévié dans le fer CC : ceux de Shigesato (2007) et Chaussidon (2007) à basse température, puis Queyreau (2008) à haute température. Parmi ces trois :

- **Queyreau** a utilisé la version la plus simple avec un critère purement mécanique qui ne permet pas de traduire le glissement non cristallographique. Dans son implémentation, les dislocations changent de plan lorsque la force de Peach-Koehler (1950) devient plus importante sur un autre plan.
- **Shigesato** utilise lui un algorithme à temps de résidence, qui introduit une probabilité non nulle de sauter dans un plan de glissement dit « dévié », dans lequel la contrainte est plus faible que dans le plan de glissement dit « principal ». Ce faisant, le glissement moyen des dislocations peut suivre le Plan de Cission Résolue Maximale (PCRM) tel qu'observé expérimentalement.
- **Chaussidon** introduit, à partir de son étude en dynamique moléculaire (Chaussidon *et al.*, 2006) la notion de régions de sollicitation en « maclage » et « anti-maclage » entre plans $\{110\}$ consécutifs à basse température (Chaussidon, 2007). Ainsi, tel que représenté dans la Fig. IV-3, dans une région d'anti-maclage le glissement des dislocations est confiné dans le plan principal (comme chez Queyreau), alors que dans une région de maclage le glissement effectif résultera de combinaisons de sauts entre le plan principal et le plan dévié selon le même algorithme de temps de résilience utilisé par Shigesato.

Notons ici que dans la nouvelle version de Tridis-BCC développée lors de ces travaux, le mécanisme de glissement dévié est désormais un paramètre d'entrée aux simulations. On peut ainsi choisir entre ces trois versions du glissement dévié, mais également le désactiver complètement en interdisant tout changement de plan [§C-6].

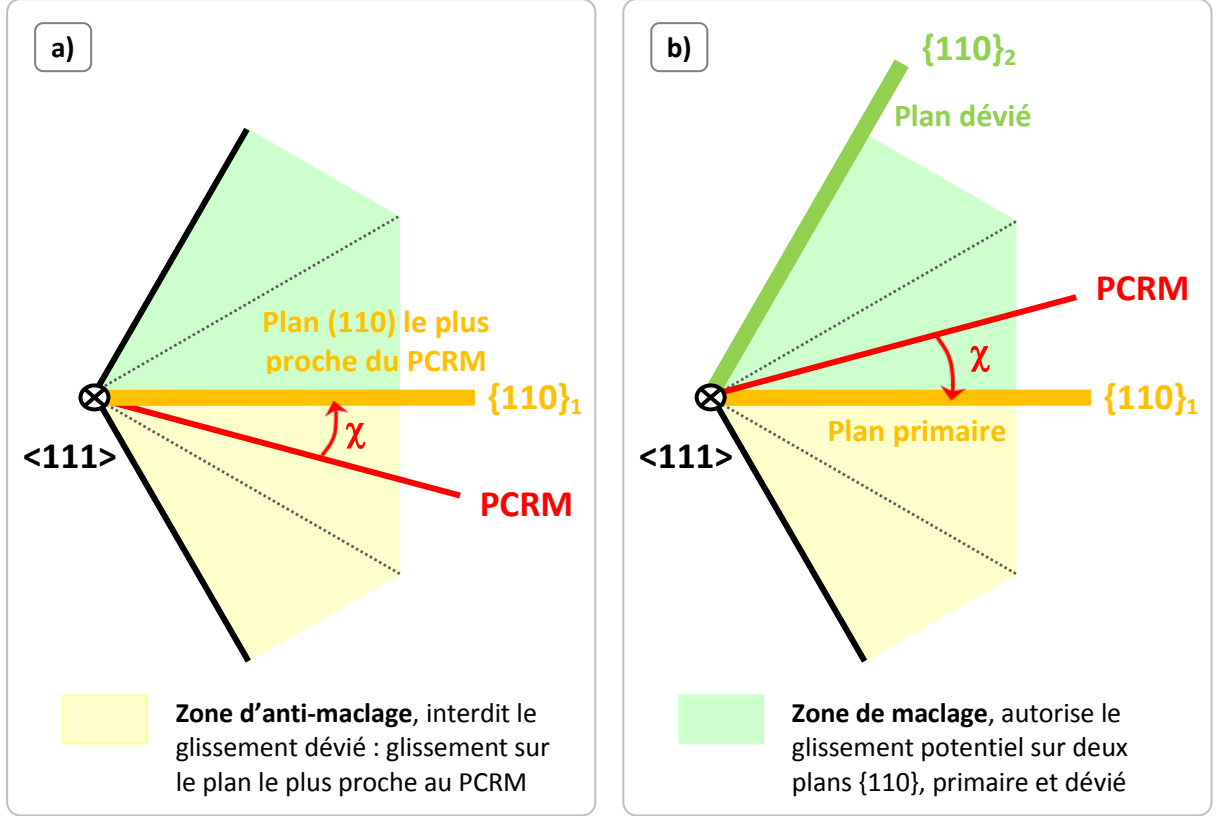


Fig. IV-3 : Deux cas de figure d'orientation de la force de Peach-Koehler (qui correspond à la trace du Plan de Cission Résolue Maximale) : a) cas du PCRM dans une zone d'anti-maclage ; b) cas du PCRM dans une zone de maclage (Chaussidon, 2007).

2.4.2 Vitesse des dislocations et probabilité de changement de plan

De nouvelles règles ont dû être introduites dans Tridis-BCC pour évaluer la vitesse des segments de dislocation dans le cas où l'on accepte le glissement dévié. La première concerne la vitesse des dislocations vis dans une région de maclage, et la deuxième la vitesse des crans croisés formés par des dislocations coin après glissement dévié d'une partie d'une ligne vis.

La **vitesse des vis dans les régions de maclage** utilise l'algorithme à temps de résidence défini par Shigesato (2007) et Chaussidon (2007) :

- La vitesse du segment est fixée à une moyenne $\langle v \rangle = v_{PP} + v_{PD}$, où v_{PP} et v_{PD} sont les vitesses calculées sur le plan de glissement primaire et dévié respectivement.
- La probabilité de glissement sur le plan principal est $P_{GP} = v_{PP} / (v_{PP} + v_{PD})$, avec la probabilité de glissement sur le plan dévié définie par $P_{GD} = 1 - P_{GP}$.
- Le choix du plan de glissement se fait en comparant P_{GP} à un nombre aléatoire compris dans $[0,1]$.

Pour le cas particulier des **crans croisés** (Louchet, 1976) (intersection de deux parties coin de directions de ligne différentes sur une même ligne de dislocation vis [Fig. IV-4]), la mobilité de l'ensemble (v_{cc}) doit prendre en compte celle des deux segments coin contigus (v_{c1} et v_{c2}). Chaussidon utilisait deux expressions différentes selon les vitesses respectives de ces segments :

- Lorsque v_{c1} et v_{c2} sont de sens opposé [cas (a)], le cran le plus mobile entraîne l'autre mais se voit freiné par ce dernier, tel que $\vec{v}_{cc} = \vec{v}_{c1} + \vec{v}_{c2}$
- Lorsque v_{c1} et v_{c2} sont de même sens [cas (b)], ce qui est à priori peu probable mais arrive de fait dans les simulations lorsque le champ de contrainte locale est très hétérogène, on affecte aux deux segments coin la vitesse moyenne $\vec{v}_{cc} = (\vec{v}_{c1} + \vec{v}_{c2}) / 2$

Notons ici que ces relations sont également valables entre les forces de Peach-Koehler respectives, puisque la vitesse des dislocations coin est linéaire en contrainte [§III-2.4.2].

Numériquement, cette formulation n'est pas satisfaisante puisqu'un saut de vitesse se produit lorsque le signe relatif des vitesses/contraintes s'inverse. Nous proposons d'utiliser une expression unique de la vitesse des crans croisés correspondant à la moyenne des vitesses respectives pondérée par la longueur de chaque segment (L_{c1} et L_{c2}), sous la forme :

$$\vec{v}_{cc} = \frac{\vec{v}_{c1}L_{c1} + \vec{v}_{c2}L_{c2}}{(L_{c1} + L_{c2})} \quad (4.1)$$

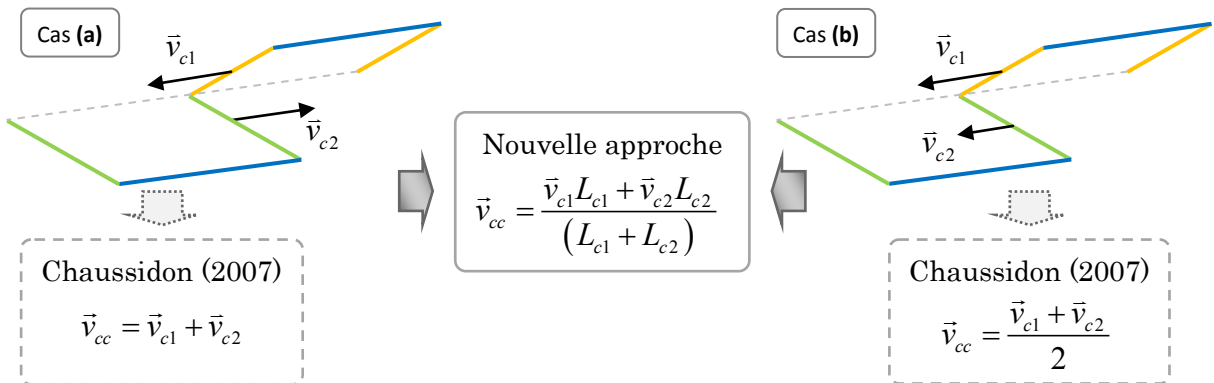


Fig. IV-4 : Calcul de la vitesse d'un cran croisé (v_{cc}) dans le code de dynamique de dislocations Tridis-BCC : comparaison entre les expressions utilisées par Chaussidon (2007) et la nouvelle expression continue utilisée dans ces travaux.

Ainsi, lorsque $L_{c1} = L_{c2}$, cette nouvelle expression continue rejoint celle utilisée par Chaussidon dans le cas (b), mais diminue de moitié la mobilité des crans dans le cas (a).

2.5 Interaction entre segments

2.5.1 Règles locales

Dans Tridis, à chaque pas de temps Δt on calcule au milieu de chaque segment la force de Peach Koehler à laquelle il est soumis. On en déduit alors une vitesse v_i , puis une distance de « vol libre » calculée suivant un simple schéma d'intégration explicite : $d = v_i \Delta t$. À partir de cette distance et de la longueur du segment, on définit la surface balayée par le segment : $dA = L \cdot v_i \Delta t$. C'est à l'intérieur de cette « aire de vol libre », que l'on cherchera des obstacles éventuels tels que d'autres segments de dislocations ou des interfaces. Cette recherche a été accélérée par la révision de la méthode de boîtes réalisée par Shin (2004) : les boîtes sont dimensionnées pour qu'un segment ne puisse pas parcourir plus d'une longueur de boîte dans un pas de temps ce qui permet de restreindre la recherche d'obstacles aux boîtes premières voisines de celle contenant le segment mobile.

Pour la suite, nous nous concentrerons sur toutes les interactions possibles (coplanaires ou 3D) entre segments de dislocations au cours d'un pas de temps de l'algorithme de calcul. Nous omettrons le cas encore en débat des jonctions dont certains détails sont disponibles dans des travaux précédents tels que la thèse de Shin (2004).

2.5.1.1 Interactions dans le plan

Lorsqu'un obstacle coplanaire est détecté dans l'aire de vol, on ignore les cas pour lesquels les systèmes de glissement sont de vecteur de Burgers différent. Ensuite, parmi ceux possédant le même vecteur de Burgers on distingue les interactions de segments de direction de ligne parallèle ou perpendiculaire.

Entre segments parallèles

Deux types d'interaction coplanaires sont programmés dans le code Tridis-BCC original :

- l'annihilation se produisant lorsque les segments ont un vecteur de Burgers opposé, avec recombinaison des lignes de dislocation concernées [Fig. IV-6a]
- la répulsion, lorsque les vecteurs de Burgers sont de même sens. Dans ce cas on arrête le segment en mouvement deux pas de réseau avant l'obstacle [Fig. IV-6b].

Ces interactions sont envisagées sans vérifier si les deux segments glissent sur le même plan. Ce mécanisme offre la possibilité d'augmenter le taux d'annihilations au cours d'une simulation (Shigesato, 2007).

Dans le cas de segments d'une ligne différente dont les extrémités sont alignées, on se limite à avancer jusqu'au niveau de l'obstacle [Fig. IV-6c]. La résolution de cette situation n'aura lieu que lors de la détection du segment perpendiculaire adjacent, au pas suivant [Fig. IV-6d et e].

Entre segments perpendiculaires

Lorsque deux obstacles sont perpendiculaires, on ne traite l'interaction que si la rencontre se produit aux extrémités du segment mobile.

On distingue alors trois cas de figure :

- Lorsque l'extrémité de l'obstacle coïncide avec celle du segment mobile, on a deux possibilités selon les signes respectifs des lignes : soit on immobilise le segment en le découpant [Fig. IV-6e], soit on recombine la ligne et on continue à avancer [Fig. IV-6d].
- Lorsque le segment mobile recouvre partiellement le segment obstacle, on découpe ce dernier en deux parties, ce qui ramène la situation au cas précédent, que l'on résoudra soit lors du mouvement de l'obstacle, soit au pas suivant.
- Lorsque le segment obstacle se trouve à l'intérieur de l'aire de vol libre, on s'arrête simplement à son niveau [Fig. IV-6c], en ramenant encore une fois la résolution postérieure au premier cas [Fig. IV-6d et e].

2.5.1.2 *Interactions entre systèmes déviés*

Outre le cas des lignes parallèles et coplanaires décrit précédemment [§2.5.1.1], un seul type d'interaction entre segments déviés était traité dans Tridis-BCC : le cas d'un segment qui perce le plan de glissement entre les extrémités d'un segment mobile. Dans cette situation on procède à un échange de voisins ou recombinaison des lignes de dislocation concernées, tel que schématisé en Fig. IV-5.

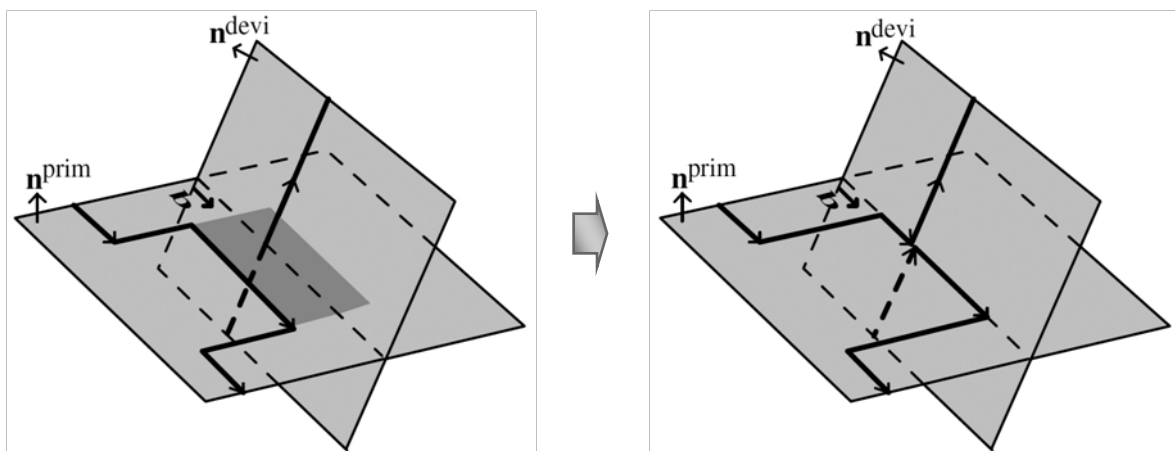


Fig. IV-5 : Recombinaison des voisins dans l'interaction avec un segment du plan dévié traversant le plan de glissement.

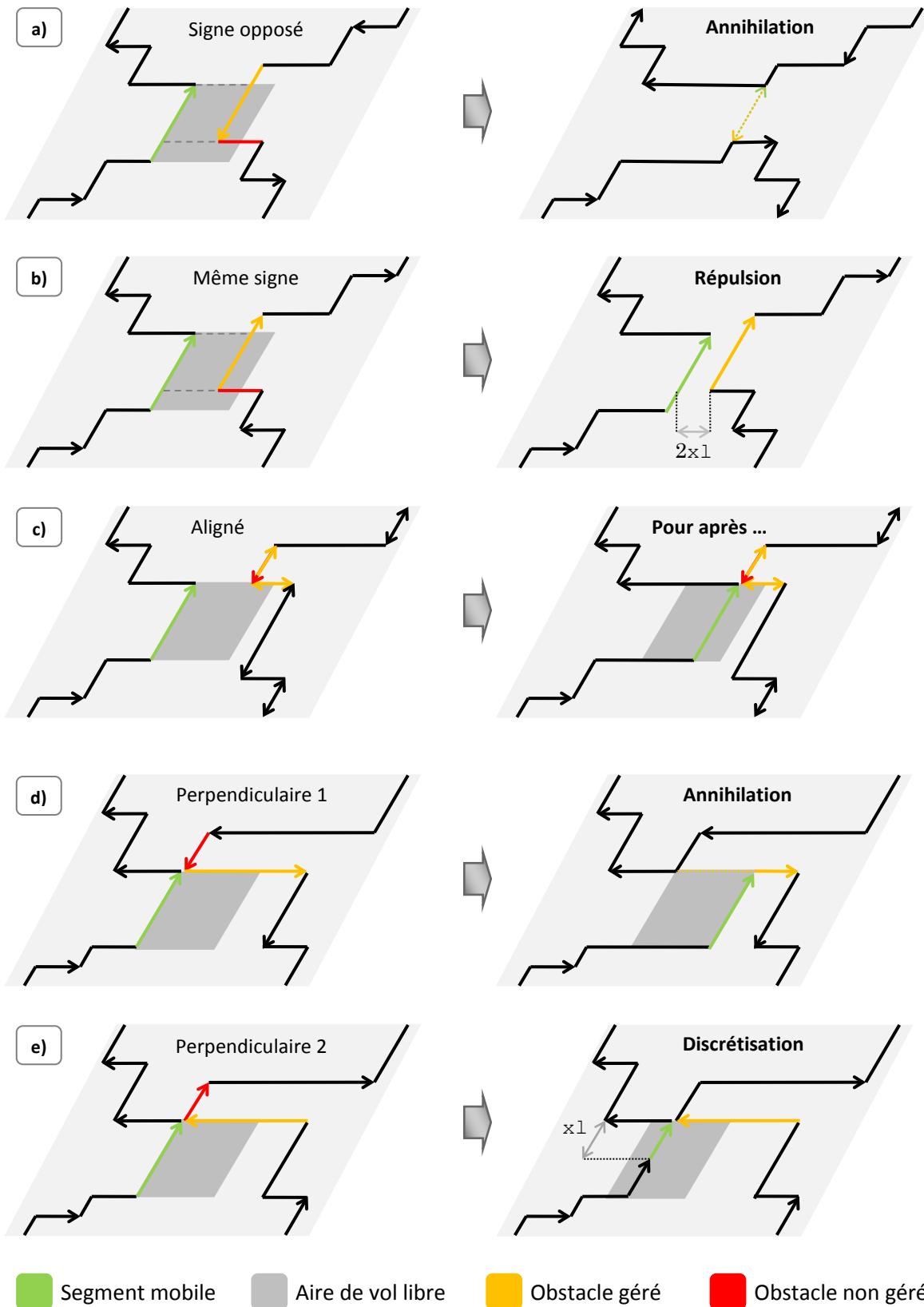


Fig. IV-6: Interactions coplanaires gérées dans le code Tridis-BCC original : **a)** même direction de ligne et même vecteur de Burgers ; **b)** même direction de ligne mais Burgers opposé ; **c)** intersection aux extrémités avec une distance à l'obstacle non nulle ; **d)** et **e)** Intersections aux extrémités lorsque la distance à l'obstacle est nulle.

2.5.2 Nouvelles règles d'interaction

Dans Tridis-BCC, la gestion des obstacles est traitée selon le processus suivant :

1. Détermination de la distance (aire) de vol libre d'un segment (*obstacle/velocity*).
2. Recherche des obstacles possibles dans l'air de vol considérée (*obstacle/obstsearch*), en ne conservant que les plus proches (il peut y en avoir plusieurs)
3. Tri des obstacles (*sort*)
4. Mouvement (*movesegment*) et interactions avec les obstacles (*dealobst/multipleobst*).

Nous avons constaté que des erreurs dans la gestion des intersections entre segments conduisent à des incompatibilités géométriques comme par exemple le recouvrement non physique de segments [Fig. IV-1]. Ces erreurs proviennent de deux sources : une détection déficiente des obstacles potentiels [§2.5.2.1], et des erreurs dans le tri, dans le cas d'obstacles multiples [§2.5.2.2]. Ces problèmes ont été corrigés en revisitant complètement les routines mentionnées précédemment. Les corrections introduites sont décrites ci-dessous.

2.5.2.1 *Détection de segments obstacles entre systèmes déviés*

L'analyse précédente rapporte un certain nombre de cas traités de manière incorrecte, lorsque le glissement dévié est activé. A titre d'exemple, citons le cas d'un obstacle perpendiculaire au segment mobile et dont les voisins se trouvent dans un plan dévié [Fig. IV-7]. Dans ce cas le segment en question n'est pas détecté [Fig. IV-6a et b] et le segment mobile croise l'obstacle sans interagir avec celui-ci [Fig. IV-7]. En effet, l'hypothèse selon laquelle il existe forcément un voisin au segment obstacle parallèle au segment mobile et contenu dans le plan de glissement n'est plus vérifiée, en présence de glissement dévié. Le nouvel algorithme de recherche d'obstacles détecte et échange les brins selon le critère de la Fig. IV-5.

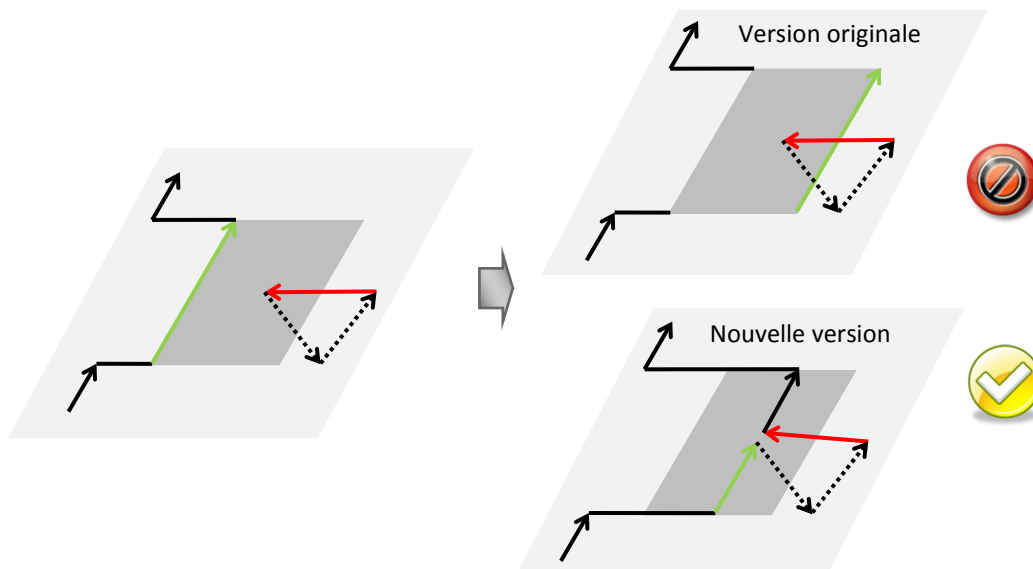


Fig. IV-7 : Exemple d'amélioration de la détection de segments obstacles déviés dans Tridis BCC.

2.5.2.2 *L'algorithme de tri d'obstacles multiples*

Dans ce processus de tri (routine `sort`), la version originale de Tridis-BCC ne retient que les obstacles coplanaires parallèles et déviés nécessitant l'échange de brins. Cette routine se charge alors de les ranger selon la distance « `idistt` », projection sur la direction de ligne du segment mobile du vecteur joignant les points de début des deux segments. Lorsque plusieurs obstacles partagent le même `idistt`, seul l'obstacle détecté en premier est conservé.

Lorsque le glissement dévié est activé cet algorithme se révèle insuffisant, et ceci d'autant plus après les modifications de la détection de segments déviés [§2.5.2.1]. Considérons par exemple le type d'intersection décrit dans la Fig. IV-6c [§2.5.1], qui peut mener à une situation où deux segments colinéaires de vecteur de Burgers opposé partagent le même point de d'origine [Fig. IV-8]. Cette configuration est possible lorsque des segments proviennent d'un plan dévié. Dans ce cas, le type d'obstacle retenu ne peut être l'objet d'un choix arbitraire puisqu'en négligeant le cas répulsif, on aboutirait à un recouvrement de segments.

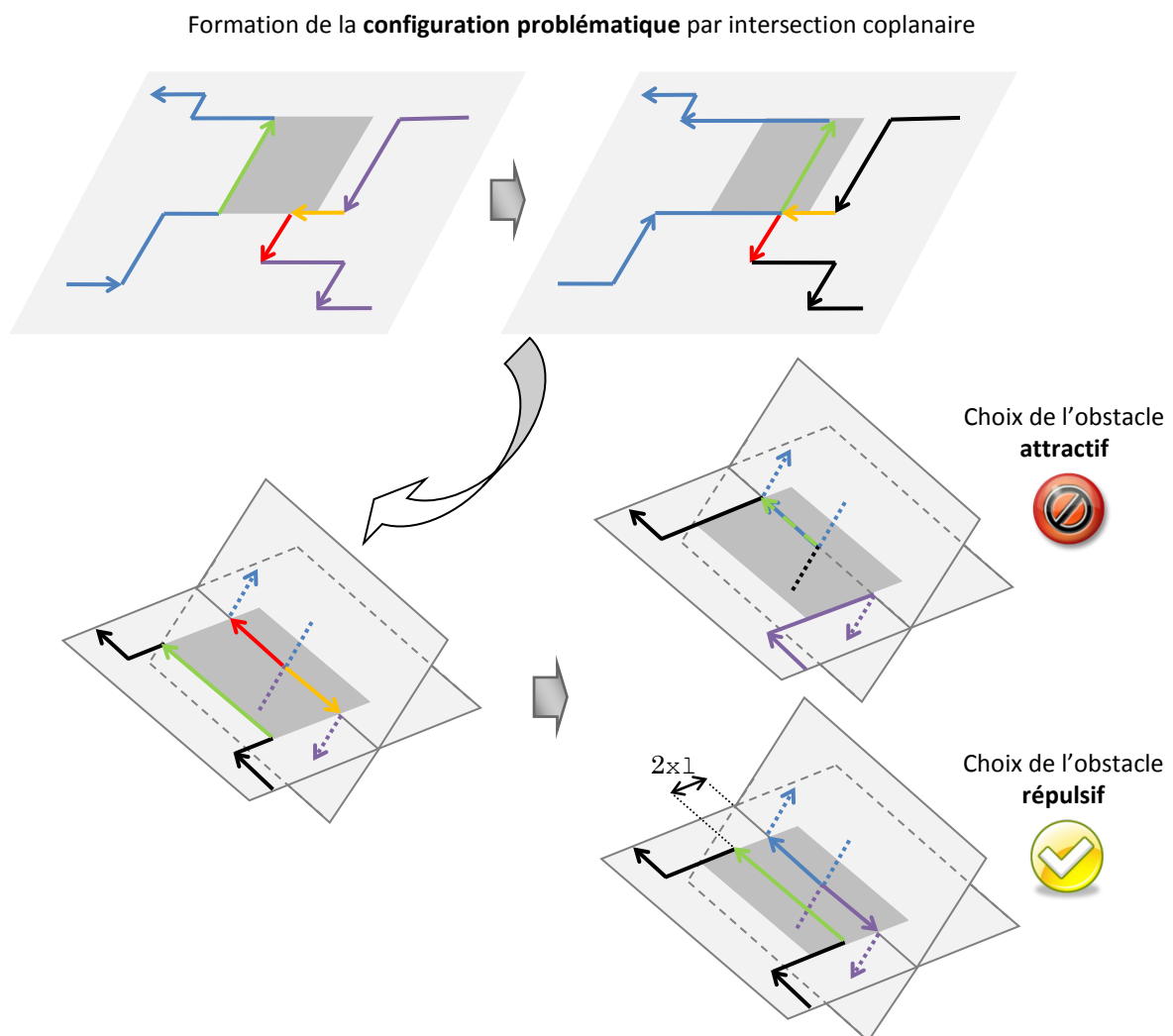


Fig. IV-8 : Exemple d'amélioration de l'algorithme de tri d'obstacles dans Tridis BCC: choix des obstacles répulsifs en priorité.

Afin de s'assurer de toujours faire le bon choix, entre les différents obstacles détectés, nous avons reformulé la routine de tri, dont l'algorithme final suit la logique suivante :

1. Range les obstacles par `idistt` croissant.
2. En cas de plusieurs obstacles possédant le même `idistt`, on choisit de préférence les coplanaires, et parmi les coplanaires les répulsifs.
3. On retire de la liste des obstacles les segments du système dévié qui percent le plan de glissement à l'endroit d'un obstacle coplanaire parallèle.

2.5.2.3 *La gestion des segments répulsifs*

Les problèmes d'instabilité rencontrés lors des simulations ne sont pas liés à une seule cause, tel que la discontinuité des lois de mobilité des segments [§2.4.2] ou à des lacunes dans la gestion des systèmes déviés [§2.5.2]. En effet, c'est souvent un cumul de facteurs qui mène à « l'explosion » de la microstructure, dont l'un des plus importants provient du schéma d'intégration explicite de la loi de mobilité.

Dans Tridis en effet, on calcule la contrainte résolue sur chaque segment dans la configuration pré-mouvement, en fonction de laquelle on lui assigne une distance de vol déterminée : $dx = v \cdot dt$. Cela suppose donc une vitesse constante sur le temps du vol et donc une contrainte constante. On ne prend donc pas en compte la variation de cette contrainte au cours du mouvement. Ainsi, un segment qui se dirige vers un segment répulsif ne ressent pas l'augmentation progressive de cette répulsion, ce qui justifie la règle consistant à arrêter le segment mobile un certain nombre de cases avant l'obstacle (2×1 , Fig. IV-6c). Cependant, si la valeur de cette distance fixée dans le code est trop petite, le segment peut se retrouver artificiellement dans une situation de très forte contrainte répulsive (autour de 500MPa pour 2×1 avec $x_1 = 10b$). Si le glissement dévié n'était pas possible cet événement ne poserait pas problème puisque le segment en question reviendrait en arrière au pas suivant. Cependant, lorsque le glissement dévié est possible le segment ainsi contraint peut changer de plan avec une très forte vitesse, conduisant alors à des configurations instables.

Une des solutions possibles à ce problème serait d'utiliser un pas de temps plus petit pour que l'approche entre segments répulsifs se fasse de manière plus progressive. Cependant, cette solution est non seulement très difficile à gérer avec une loi de mobilité exponentielle, mais restreint aussi la durée et le taux de déformation accessibles lors des simulations massives. Dans notre approche nous avons réussi à éviter ce type de configurations problématiques en :

- introduisant une distance d'arrêt variable (« λ »),
- modifiant l'interaction entre obstacles présentée en Fig. IV-9

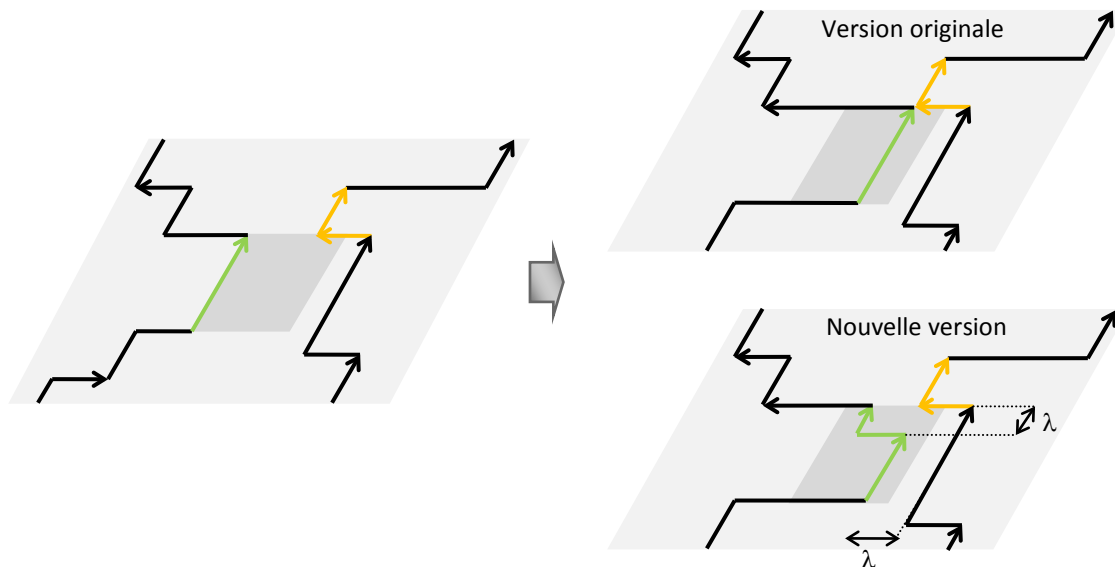


Fig. IV-9 : Modification de l'interaction entre lignes de dislocation répulsives à Tridis BCC.

2.6 La division des pas de temps entre segments vis et coin

Une dernière difficulté relevée lors de ces travaux provient de la gestion de la différence de mobilité entre dislocations vis et coin à basse température et la progressive disparition de cette disparité à plus haute température.

Afin de stabiliser les simulations menées à basse température, Chaussidon (2007) avait introduit la « relaxation des segments coin ». Dans cette approche, le mouvement des segments vis et coin sont dissociés, les premiers n'avancant qu'une fois tous les n pas de temps. Cette différenciation permet l'annihilation de segments vis fortement contraints par déplacement des parties coins, ce qui stabilise les simulations et empêche la formation des configurations instables évoquées précédemment [§3]. Cependant, cette démarche n'est plus utilisable à l'approche du régime athermique, que ce soit à forte contrainte ou température puisqu'elle équivaudrait à augmenter artificiellement la vitesse des segments coin d'un rapport n par rapport aux segments vis.

Pour s'affranchir de ces limitations, nous avons préféré introduire deux pas de temps différents pour les parties coin et vis au lieu de « relaxer les segments coin », ce qui contribue à stabiliser la microstructure à basse température sans pour autant modifier les vitesses des dislocations et les travaux/vitesse de déformation qui leur sont associés, quel que soit le régime considéré. Ainsi, dans notre implémentation :

- le nombre de pas de mouvement coin par pas de mouvement vis (n) reste un paramètre d'entrée à régler selon les conditions des simulations,
- le pas de temps des segments coin est diminué tel que

$$t_{coin} = t_{vis} / n \quad (4.2)$$

Notons finalement que cette approche n'élimine pas toutes les sources d'instabilité, du fait de la différence de mobilité vis/coin qu'implique des valeurs de n trop élevées ($n > 10$).

2.7 Discussion

Dans ce paragraphe, nous comparons l'évolution de la microstructure de dislocations et de la déformation en flexion de la simulation de référence (latte de ferrite) avec les différentes versions du code Tridis ici développées et notées par la suite :

- « DGR0 » : dernière version assurant l'identité des résultats avec le code original : pas par pas, segment par segment, jusqu'au dernier pas de calcul.
- « DGR1 » : version après correction des erreurs de codage mais qui conserve l'implémentation originale du mouvement des segments.
- « DGR2 » : version qui intègre les modifications des interactions entre segments [§2.5.2] mais conserve la disparité de mobilité entre vis et coin du code originale.
- « DGR3 » : nouvelle version du code qui intègre toutes les modifications décrites précédemment.

Dans tous ces cas, tous les paramètres d'entrée de la simulation sont identiques à ceux utilisés par Chaussidon, y compris au niveau de la loi de mobilité des dislocations vis.

Dans la Fig. IV-1a nous avons déjà vu le caractère instable de la formation de la microstructure observée dans la simulation de référence (explosion du nombre de segments), qui apparaît pratiquement dès le départ de la simulation avec le code DGR1. Dans la Fig. IV-10a nous montrons l'évolution du nombre de segments au cours de la simulation pour les 4 codes ici considérés. La Fig. IV-10b montre l'évolution de la courbure dans la latte.

Pour ce cas d'étude nous constatons que :

- la modification du traitement des interactions entre segments (DGR2) est suffisante pour éviter l'instabilité constatée avec les codes DGR1 et DGR2 [Fig. IV-10a].
- la version finale (DGR3) est encore un peu plus stable (moindre multiplication dans la latte, et aucune inflexion visible sur les segments dans le domaine virtuel) [Fig. IV-10a], mais présente aussi d'autres avantages :
 - Les segments coin avançant désormais à leur vitesse réelle, la multiplication dans le domaine virtuel est réduite d'autant, ce qui accélère beaucoup les simulations [Fig. IV-10a].
 - Elle permet de bien suivre l'asservissement imposé, alors qu'avec les codes DGR0 à DGR2 la vitesse de courbure initiale est trop importante du fait de la mobilité artificiellement élevée des parties coin, lorsque les premières dislocations pénètrent la latte [Fig. IV-10b].

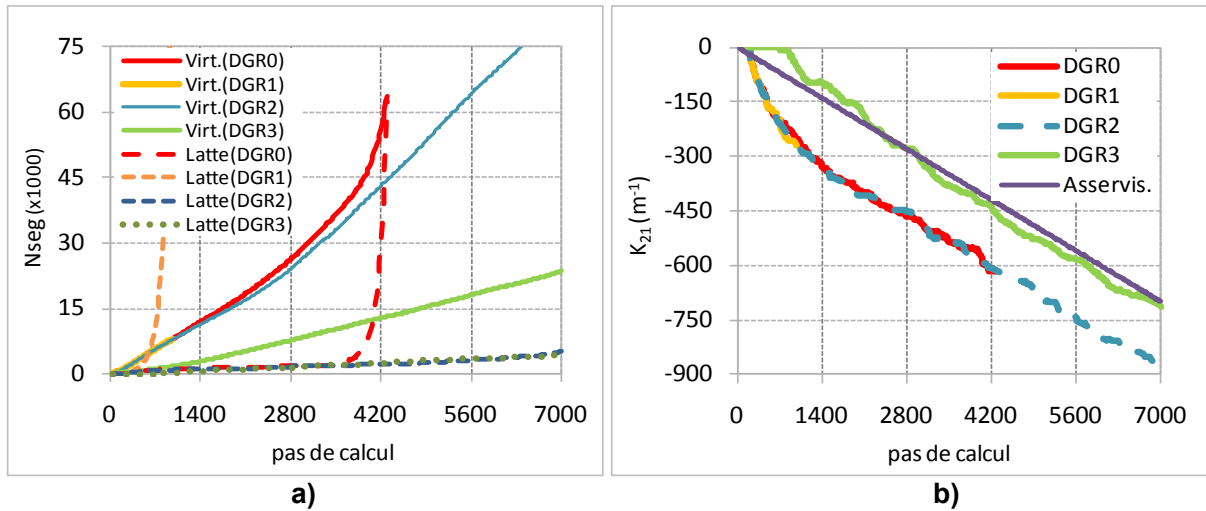


Fig. IV-10 : Comparaison de l'évolution de la simulation de référence [§2.2] avec les codes DGR0 à DGR3 (voir description dans le corps du texte) : **a)** Évolution du nombre de segments au cœur de la latte et dans le domaine virtuel ; **b)** Evolution de la courbure de la latte par rapport à l'asservissement imposé.

3 Amélioration des performances du code

3.1 Introduction

Avant d'entrer dans le détail des techniques mises en place pour accélérer le code, précisons que l'intérêt des deux parties abordées dans ce paragraphe ne se limite pas à Tridis. En effet, les techniques évoquées plus bas peuvent également être utilisées dans le nouveau code DD nodal en développement au SRMA/SIMAP : aNumodis.

Nous verrons au passage que la remise à niveau du code telle que présentée en [§C] ainsi que les améliorations apportées à la gestion des segments [§2] ont déjà permis de réduire considérablement le temps de calcul.

3.2 Utilisation de la librairie mathématique BLAS

3.2.1 Introduction

La librairie BLAS [« *Basic Linear Algebra Subprograms* » (Lawson *et al.*, 1979)], disponible dans des langages comme le Fortran ou le C, est un ensemble de routines de calculs d'algèbre linéaire, permettant de tirer parti des particularités hardware (registres, mémoire, jeux d'instruction spécifiques) de chaque système de calcul.

L'idée est de leur confier ce type de calcul, fréquent dans un code comme Tridis, pour obtenir des gains de temps potentiellement très élevés.

Les résultats obtenus se sont malheureusement avérés décevants puisqu'aucun gain de temps n'a été constaté mais qu'au contraire, les temps de calculs augmentent lorsqu'on utilise les routines de BLAS. Nous avons alors entamé une étude plus systématique des performances de BLAS consistant à tester les performances intrinsèque de cette librairie dans des configurations types similaires à celles rencontrées dans TRIDIS. Cette étude est rapportée ci-dessous.

3.2.2 Cas des calculs avec des matrices 3x3

Tridis calcule très fréquemment des tenseurs de contrainte en 3D, et nous nous sommes donc naturellement intéressés aux performances envisageables pour des calculs avec des matrices de dimension 3x3. Pour cela nous avons établi une batterie de tests simples : calculs en boucle sur des matrices générées aléatoirement en utilisant :

- Deux routines BLAS, largement utilisées dans l'adaptation BLAS de Tridis-BCC, et ses équivalents programmés directement dans le code :
 - o Dnrm2, qui calcule la norme d'un vecteur.
 - o Dgemv, qui calcule un produit matrice-vecteur sous la forme $Y = c2 \cdot AX + c1 \cdot Y$, où A est une matrice, X et Y des vecteurs, et $c1$, $c2$ des constantes réelles.
- Deux compilateurs différents :
 - o GNU (g77), qui est un logiciel libre, disponible dans toutes les distributions de Linux/Unix.
 - o PGI (pgf77), qui est un logiciel payant, commercialisé par « *The Portland Group* ».
- Deux implémentations différentes de BLAS, adaptées à chacun des compilateurs :
 - o ATLAS, pour accompagner g77.
 - o ACML (« *AMD core math library* »), pour accompagner PGI, et qui est optimisée pour les processeurs AMD.

Nous avons profité par ailleurs de ces tests pour analyser la performance relative entre l'expression x^{**2} ou $x*x$ pour calculer le carré d'un nombre réel en Fortran. Bien que ces expressions semblent équivalentes, l'interprétation des compilateurs peut parfois réserver de mauvaises surprises. Ainsi par exemple, le compilateur `g77` interprète en effet l'expression x^{**2} comme une puissance réelle, ce qui conduit à un temps de calcul presque cinq fois plus élevé que pour $x*x$.

Le Tableau IV-2 montre, pour chaque configuration, le temps moyen de trois calculs réalisés sur le cluster Tuamotu du SRMA à base de processeurs AMD Opteron dual core 2220SE - 2.8GHz. Pour chaque cas, les valeurs présentées correspondent au ratio du temps de calcul indiqué par rapport à la solution prise comme référence : `pgf77` sans BLAS.

Nous constatons ici que, pour cette configuration, l'utilisation de BLAS n'est pas avantageuse. Dans un premier temps, nous avons considéré que la perte de performance pouvait ne pas être due à l'inefficacité des routines BLAS, mais au temps nécessaire pour l'appel d'une routine externe. Nous verrons dans la section suivante que ceci n'est pas le cas.

Opération	g77		pgf77	
	sans BLAS	avec BLAS	sans BLAS	avec BLAS
Dgemv	2,1	5,6	1	6,0
Dnrm2 (x^{**2} / $x*x$)	4,87 / 1,1	2,0	0,9 / 1	2,8

Tableau IV-2 : Rapport des temps de calcul avec et sans BLAS pour les fonctions `Dgemv` et `Dnrm2` et les compilateurs GNU (`g77`) et PGI (`pgf77`), la référence étant la version avec `pgf77` sans BLAS (et l'écriture $x*x$ au lieu de x^{**2} dans le cas de `Dnrm2`).

3.2.3 Cas des calculs avec des matrices carrées ($N \times N$) de dimensions variables

Les résultats avec des matrices 3×3 ont confirmé ceux que nous avons obtenus avec Tridis : faire appel aux routines BLAS a un impact négatif sur le temps des calculs simples. Nous nous sommes alors interrogés sur la taille des matrices à partir de laquelle l'utilisation des routines BLAS pourrait devenir intéressante.

Pour répondre à cette question, nous avons modifié le programme de test pour prendre en compte des matrices avec une taille ($N \times N$) croissante. Pour analyser plus spécifiquement l'influence du temps d'appel à routine en soit, nous avons également programmé en Fortran des fonctions similaires à celles de BLAS, notées avec le suffixe D dans la Fig. IV-11.

Pour les tailles de matrices analysées ici on observe que :

- Pour des calculs du type `Dnrm2`, l'appel à BLAS n'est pas justifié [Fig. IV-11a, b].
- Pour des calculs plus complexes, BLAS peut se montrer avantageux pour des matrices de grande taille (à partir de $N = 13$ pour `Dgemv`) [Fig. IV-11c].
- Les optimisations réalisées par certains compilateurs payants comme PGI semblent plus efficaces que l'utilisation des librairies BLAS [Fig. IV-11d].
- Des opérations simples comme le carré d'un nombre réel peuvent être mal interprétées par un compilateur, pouvant avoir un grand impact sur le temps de calcul [Fig. IV-11a].
- Bien qu'appréciable pour `Dnrm2`, le temps d'appel à une routine devient rapidement négligeable pour des calculs complexes comme `Dgemv` [Fig. IV-11].

En conclusion de cette analyse, on notera que l'accélération d'un calcul avec BLAS est possible mais pas évidente. Il faudra entre autre tenir compte du compilateur, de l'implémentation de BLAS, de la taille et de la complexité du calcul pour juger de son utilité.

Dans le cas de Tridis, la taille des matrices reste petite et les opérations relativement simples (dont la complexité n'excède pas souvent celle de $Dgemv$). L'intérêt de BLAS est donc très limité, voire nul, et nous avons abandonné cette voie d'optimisation du code. Cependant, dans un code de dynamique de dislocations nodal comme aNUMODIS, on résout des systèmes matriciels similaires à ceux des méthodes par éléments finis dont la taille est dictée par le nombre de nœuds à gérer ; l'utilisation de BLAS devrait alors être intéressante, notamment avec le compilateur GNU.

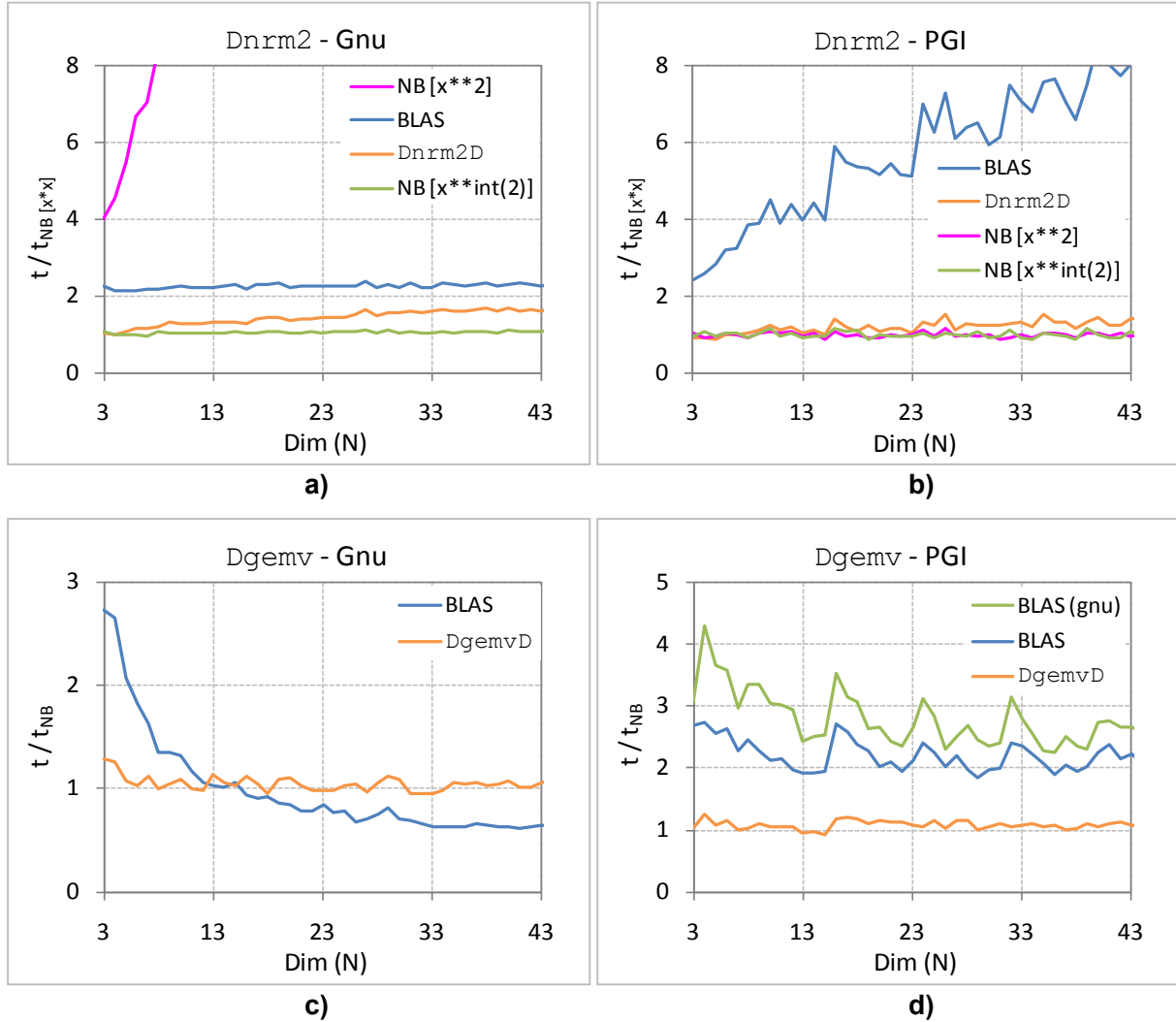


Fig. IV-11: Analyse des performances de BLAS en Fortran avec des vecteurs de taille N et des matrices de taille $N \times N$. Les figures a) à d) montrent l'évolution du temps de calcul avec une taille de matrice N croissante pour deux routines ($Dgemv$ et $Dnrm2$) et deux compilateurs/librairies différents (Gnu et PGI). L'axe des ordonnées représente le ratio du temps de calcul de chaque cas avec celui pour un calcul semblable sans utilisation de BLAS (=1 à égalité de performances). Dans le cas de $Dnrm2$ on analyse en plus la différence entre les expressions $x*x$ et $x**2$ (avec et sans conversion explicite de l'exposant entier) pour le calcul du carré d'un nombre réel sans BLAS [« NB »]. Les routines $DnrmD$ et $DgemvD$ sont des routines programmées sans BLAS pour analyser l'impact du coût d'appel à la routine.

3.3 Une nouvelle méthode des boîtes

La durée d'une simulation de dynamique des dislocations est liée pour une partie significative au calcul des contraintes internes, *i.e.* aux interactions élastiques entre segments de dislocations. Le coût de ce calcul à N corps (N étant le nombre de segments) évolue en effet en N^2 dans la mesure où on doit calculer la force qu'exerce chaque segment sur tous les autres segments de la simulation, à chaque pas de temps [Fig. IV-12a]. On estime que cette opération représente environ 50% du temps de calcul pour une simulation standard prenant en compte quelques dizaines de milliers de segments, voire qu'elle dimensionne le nombre maximum de segments qu'il est possible de traiter.

La « méthode des boîtes », initialement proposée par Verdier *et al.* (1998) puis améliorée par Shin (2004), permet de réduire le coût de ce calcul de façon significative. Son principe est de simplifier le calcul des interactions dites « à longue distance » (*i.e.* lorsque la distance qui sépare deux segments est très supérieure à leur longueur) moyennant deux approximations, l'une spatiale et l'autre temporelle. Partant de ces mêmes approximations, nous proposons ici une reformulation encore plus efficace.

3.3.1 La méthode des boîtes originale à Tridis

La méthode des boîtes s'appuie sur la forte décroissance du champ de contrainte d'une dislocation avec la distance. On peut ainsi considérer qu'un segment donné ne ressent que très faiblement le champ de contrainte des dislocations lointaines. Plus concrètement, dans la méthode des boîtes (Verdier *et al.*, 1998), la distinction entre ces deux populations (lointaine et proche) est réalisée en découpant l'espace de simulation en N_b « boîtes » de taille régulière, puis en établissant un critère de proximité en nombre de couches de boîtes entourant celle qui contient le segment ($n_{layerSR}$). Par exemple, avec $n_{layerSR} = 1$, on considérera comme « longue distance » les boîtes à partir des 2^{ème} voisines (donc au-delà des 27 boîtes entourant le segment considéré). Bien évidemment, la taille des segments de dislocation doit rester toujours inférieure à celle des boîtes.

Une fois le découpage réalisé, la **contrainte à longue portée** sur tous les segments d'une boîte « source » est estimée à partir de deux approximations [Fig. IV-12] :

- une approximation spatiale : on approxime le champ de contrainte sur le segment cible par la contrainte calculée au centre de sa boîte. Ceci permet de réduire le nombre d'évaluations à faire par boîte [$\sim$ méthode multi-pôles aux cibles (Darrigrand, 2002)].
- une approximation temporelle : le déplacement des segments étant relativement faible par rapport à la taille des boîtes, on considère que le champ de contraintes des segments lointains reste constant pendant « $n_{updateLR}$ » pas de temps de calcul (paramètre à définir par l'utilisateur).

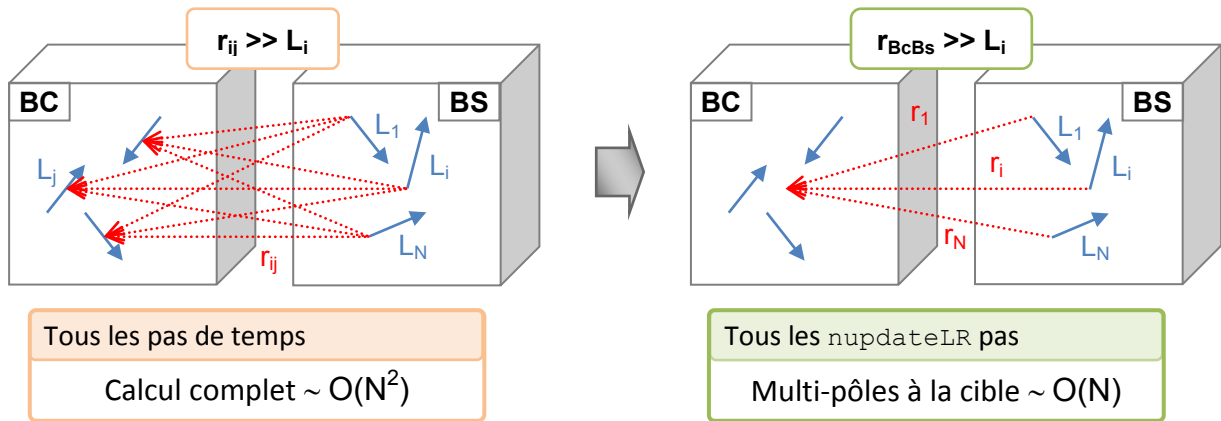


Fig. IV-12 : Illustration du principe de la méthode des boîtes originale de Tridis pour le calcul de la contrainte interne à longue portée. D'une part, on considère que la distance entre un segment et les boîtes lointaines est très proche de celle entre le segment et le centre de la boîte lointaine ($\sim$ multi-pôle aux sources). D'autre part, on considère que la contribution des segments lointains n'évolue pas rapidement, et qu'il n'est nécessaire de l'actualiser que tous les $n_{updateLR}$ pas de calcul.

La **contrainte à courte portée** est estimée à partir des champs de contraintes de tous les segments contenus dans les boîtes voisines et celle contenant le segment considéré (pour $n_{layer} = 1$, on calcule la somme des tenseurs de contraintes engendrés par les segments contenus dans les 27 boîtes entourant le segment). Cette grandeur est réévaluée à chaque pas de calcul.

3.3.2 Une reformulation de la méthode des boîtes

3.3.2.1 Présentation théorique

La révision proposée consiste à simplifier le calcul du champ de **contrainte à longue portée** d'un segment de dislocation. Traditionnellement, le champ de contrainte d'un segment est obtenu par la formule de Li (1964) comme la différence des champs de deux segments semi-infinis, en vertu des propriétés de superposition valables en élasticité linéaire. On obtient ainsi :

$$\sigma_{ij}(r) = \sigma_{ij}^{Li}(r) - \sigma_{ij}^{Li}(r - Lk) \quad (4.3)$$

Où :

- $\sigma_{ij}(r)$: champ de contrainte créé par le segment de longueur L au point r .
- $\sigma_{ij}^{Li}(r)$: champ de contrainte créé par un segment semi-infini.
- On considère ici le cas d'un segment aligné avec l'axe z du repère (O, i, j, k) [Fig. IV-13].

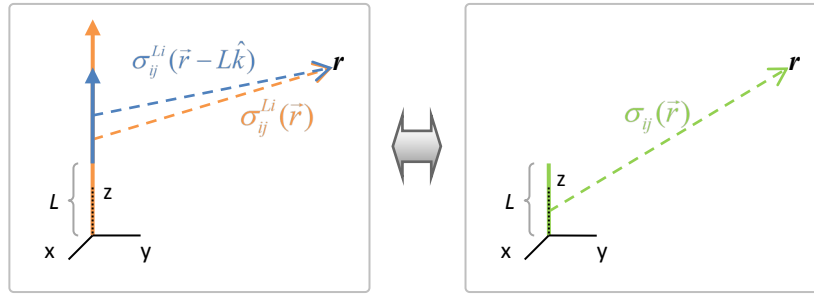


Fig. IV-13 : Schéma de principe du calcul du champ de contrainte d'un segment fini à partir de la formule de Li (1964). On calcule la contrainte d'un segment fini en un point comme la soustraction du champ de contrainte en ce point de deux segments semi-infinis.

L'évaluation du champ de contrainte requiert une rotation adéquate pour positionner le segment sur l'axe des z . Bien qu'elle comporte l'inconvénient de présenter une singularité dans l'axe « positif » du segment, cette formule est utilisée dans la plupart des codes de dynamique des dislocations.

La méthode que nous proposons ici repose sur la même hypothèse de base que la méthode originale (faible influence du champ à longue distance).

Dans un premier temps, nous simplifions l'expression de la contrainte en faisant un développement en série de Taylor du second terme de l'eq. (4.3) pour $r \gg L$. En négligeant les termes de second ordre en (L/r) nous aboutissons alors à :

$$\sigma_{ij}(r) = L \frac{\partial \sigma_{ij}^{Li}}{\partial z}(r) \quad (4.4)$$

A partir de cette expression (« formule de Dupuy »), nous montrons [§E] que le champ à longue portée du segment se caractérise par :

- une dépendance en $1/r^2$ (et non $1/r$ comme pour un segment semi-infini),
- une linéarité en L ,
- une absence de divergence dans l'axe « positif » du segment.

L'expression de la dérivée de $\sigma_{ij}^{Li}(r)$ ayant un nombre d'opérations similaire à un calcul unique de $\sigma_{ij}^{Li}(r)$ [au lieu de deux auparavant (4.3)], on obtient un gain en performances correspondant.

La deuxième amélioration consiste à approximer la distance entre segments de boîtes lointaines par celle entre les milieux de leurs boîtes respectives (on rajoute ici une approche « multi-pôle aux sources » à celle « multi-pôle aux cibles » de la méthode des boîtes originale). Dans ces conditions, et en tirant partie de la linéarité en L , la contribution à la contrainte à longue portée de tous les segments d'une même boîte peut s'écrire comme une combinaison linéaire simple des coefficients de son tenseur de Nye (1953) défini comme :

$$M_{ij} = \sum_{k=1}^N L^k b_i^k l_j^k \Rightarrow \sigma_{ij}^{Bs \rightarrow Bc}(r_{BsBc}) \sim c.l. \{M_{ij}^{Bs}\} \quad (4.5)$$

avec :

- $\mathbf{l}$: vecteur ligne.
- $\mathbf{b}$: vecteur de Burgers.
- L^k : longueur du segment k de la boîte.
- $\sigma_{ij}^{Bs \rightarrow Bc}$: contrainte à longue portée de tous les segments de la boîte source (Bs) sur n'importe quel segment de la boîte cible (Bc)

Dans le cas particulier de Tridis où l'on dispose d'une base finie de vecteurs ligne/vecteurs de Burgers (16 dans le cas CC), cette expression est particulièrement avantageuse, puisqu'on peut réécrire :

$$M_{ij} = \sum_{k=1}^N L^k b_i^k l_j^k = \sum_{k=1}^N L^k A_{ij}^k \quad (4.6)$$

Cette formule ne fait alors intervenir que 16 matrices A_{ij}^k qui peuvent être pré-calculées à l'initialisation du code, ce qui simplifie extrêmement le calcul des M_{ij} pour chaque boîte.

La Fig. IV-14 schématise cette technique dans laquelle on montre comment calculer la contribution de chaque segment sur le centre de la boîte cible, en calculant la matrice M , puis la contribution à la contrainte comme une combinaison linéaire des coefficients de M .

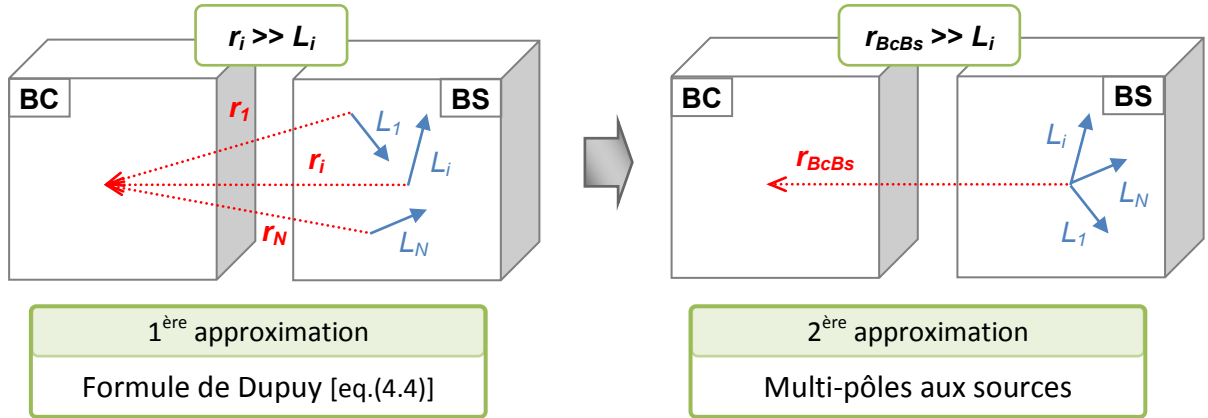


Fig. IV-14 : Approximations dans la nouvelle méthode des boîtes. On calcule d'abord le tenseur de Nye M pour chaque boîte source BS (ne dépend que des segments contenus dans la boîte), puis on obtient sa contribution sur les boîtes cibles BC comme une combinaison linéaire qui n'implique que les composantes de $\mathbf{r}_{B1B2}$ (joignant le centre des boîtes) et les coefficients de M .

3.3.2.2 Application numérique

Dans un premier temps, nous avons vérifié numériquement que le champ de contrainte d'un segment de dislocation décroît bien en $1/r^2$, à la différence de celui des dislocations infinies ou des segments semi-infinis qui décroissent en $1/r$. La Fig. IV-15, comportant une comparaison entre les calculs de la contrainte à partir de la formule exacte de Li et avec notre approximation dans un cas général, montre que c'est effectivement le cas.

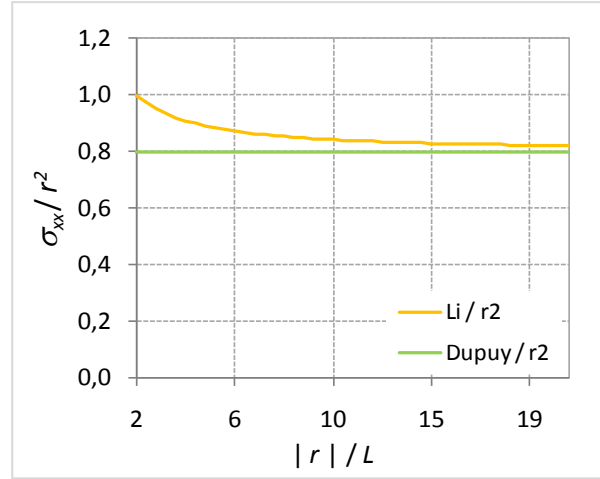


Fig. IV-15 : Comparaison entre la nouvelle approximation et la formule exacte de Li (1964) pour le calcul de la contrainte d'un segment à longue portée (cas générale). Le graphique montre le ratio entre la valeur de la contrainte selon chaque formule et la valeur de $1/r^2$ lorsqu'on s'éloigne de l'origine selon la direction [111]. On constate ainsi la décroissance $1/r^2$.

Par ailleurs, cette étude succincte a permis de mettre en évidence les cas pour lesquels l'erreur associée à notre approximation est la plus élevée. Nous montrons entre autre que l'erreur n'est pas homogène dans l'espace. Un exemple simple peut être traité analytiquement dans le cas de σ_{yz} évaluée dans la direction $\langle 010 \rangle$ (on aurait la même chose avec σ_{xz} selon $\langle 100 \rangle$) où la contrainte dans la nouvelle approximation est nulle :

$$\sigma_{yz} = \frac{L}{r^2} \left(b_z (1-\nu) \cancel{\frac{x}{r}} + b_x \nu \cancel{\frac{z}{r}} + 3 \cancel{\frac{y}{r}} \cancel{\frac{z}{r}} \left(b_y \frac{x}{r} - b_x \frac{y}{r} \right) \right) \quad (4.7)$$

Ceci est reflété dans la Fig. IV-16, où l'on observe tout d'abord que les termes négligés sont bien d'ordre inférieur à $1/r^2$ [Fig. IV-16a], ensuite que notre approximation devient plus performante dès qu'on s'écarte d'une simple longueur de segment de la direction $\langle 010 \rangle$ [Fig. IV-16b].

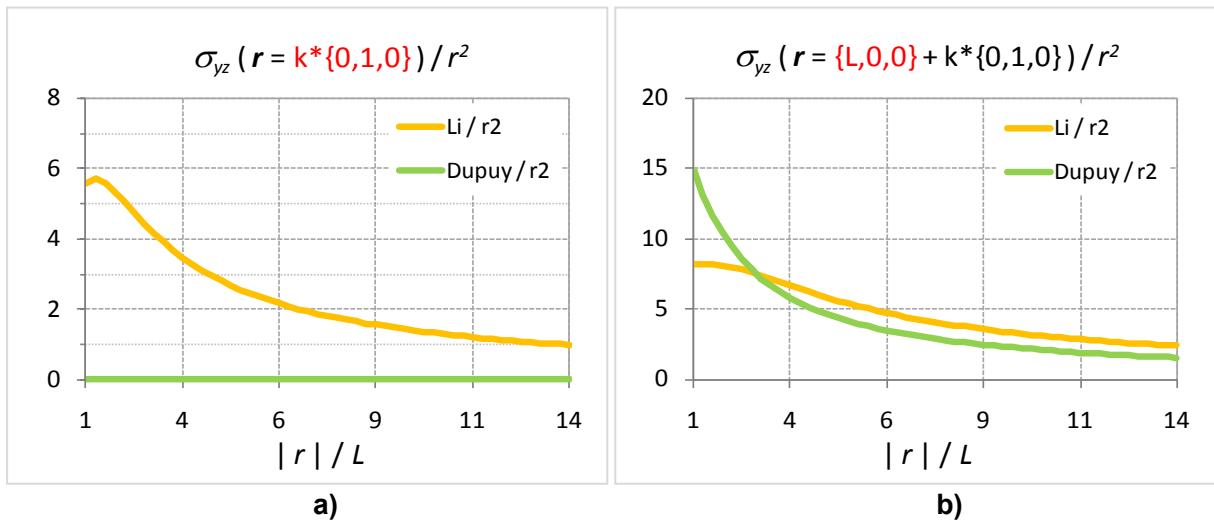


Fig. IV-16 : Comparaison entre la nouvelle approximation et la formule exacte de Li (1964) pour le calcul de la contrainte d'un segment à longue portée (cas le plus pénalisant). Le graphique montre le ratio entre la valeur de la contrainte selon chaque formule et la valeur de $1/r^2$. On constate comment dans des cas particuliers, la nouvelle approximation est particulièrement mauvaise. Cependant, les termes négligés décroissent bien plus vite que $1/r^2$ et sont localisés dans des directions très précises.

3.3.2.3 *Analyse de l'erreur.*

Pour analyser l'erreur en contrainte associée à la nouvelle méthode des boîtes [Fig. IV-17], nous avons introduit un nouveau paramètre de control (`ls_mode`) dans le code, qui permet à l'utilisateur de choisir la méthode de calcul de la contrainte à longue portée.

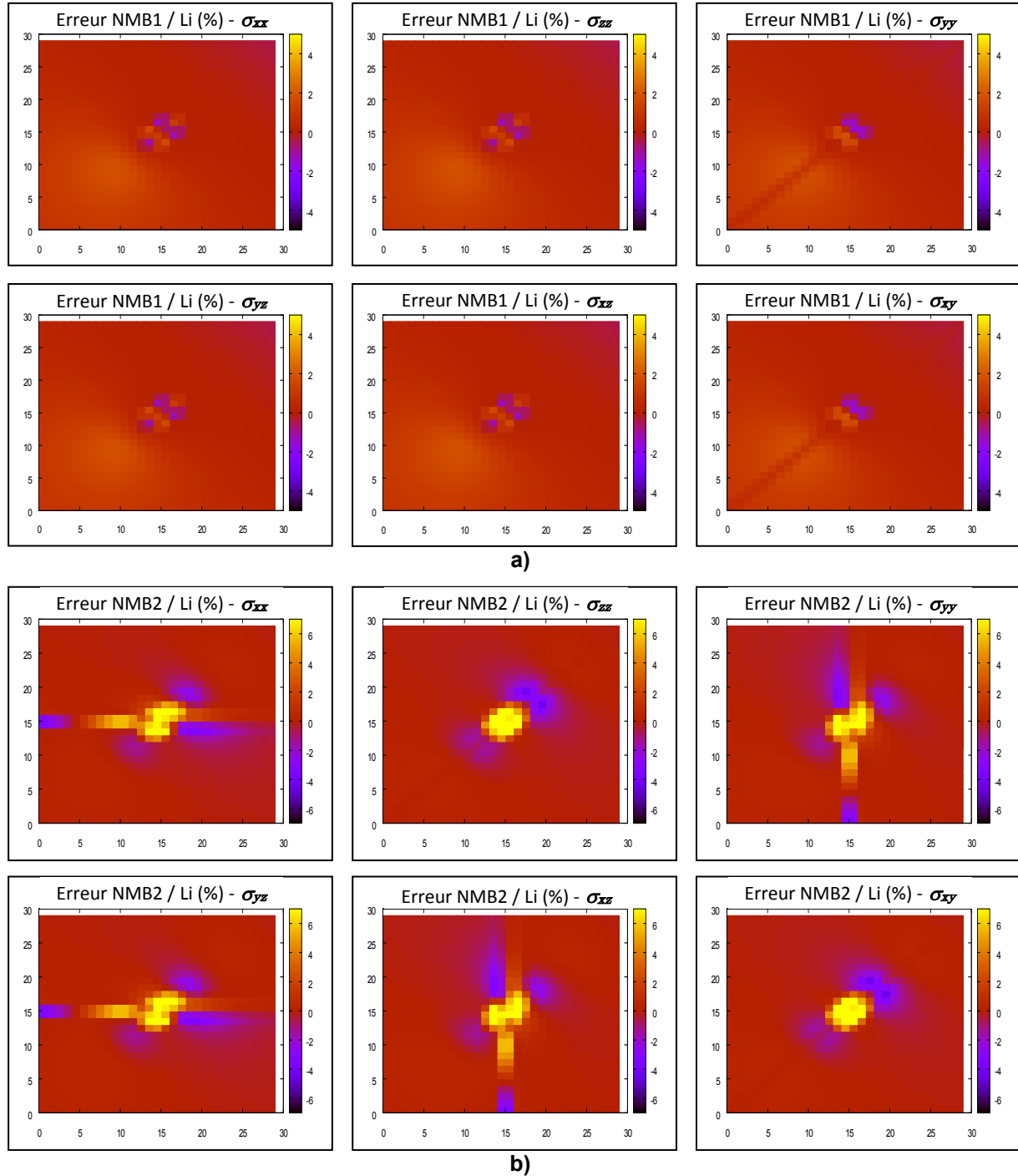


Fig. IV-17 : Cartographies de l'erreur associée à la nouvelle méthode des boîtes pour le calcul à longue portée de la contrainte interne des segments dans Tridis [Fig. IV-14]. On calcule la contrainte créée par une dislocation qui traverse le domaine de simulation au point milieu de chacune des boîtes dans un plan $z = \text{cte}$ (30x30 boîtes). Les valeurs ainsi calculées sont comparées aux résultats en utilisant la formule exacte de Li (1964). **a)** montre l'erreur associée à l'approximation en L/r^2 (NMB1); **b)** montre l'erreur totale de la nouvelle méthode des boîtes, qui comprend une approximation monopôle aux sources additionnelle (NMB2).

Les caractéristiques de ce calcul données en unités de réseau de la simulation sont :

- Un seul segment de dislocation vis centré dans l'espace de la simulation
 - o Vecteur de ligne ($\boldsymbol{l}$) = [-1,-1,1].
 - o Longueur du segment (L) = 5000, discrétisé en 167 sub-segments.
- Calcul de la contrainte au centre de toutes les boîtes dans un plan $z = \text{cte}$.
- $N_{\text{BOITES}} = 30^3 / \text{Arête d'une boîte} = 333 \sim 10 \text{ isdl}$ (longueur de discrétisation des vis).
- $n_{\text{LayerSR}} = 1$ (on utilise l'approximation à longue portée dès les premières voisines).

La Fig. IV-17a montre l'erreur de la nouvelle formulation approximée en L/r^2 de contrainte à longue portée (« NMB1 »), alors que Fig. IV-17b donne l'erreur totale de la nouvelle méthode des boîtes (« NMB2 »). Nous notons tout d'abord que l'erreur se concentre sur des régions de l'espace précises, comme annoncé dans la discussion précédente [§3.3.2.2]. Par ailleurs, l'erreur est commise majoritairement dans l'approximation monopôles aux sources et reste toujours inférieure à 5-6%. Compte tenu de la décroissance en $1/r^2$ du champ, on considère que l'erreur est largement admissible.

3.4 Le gain en performances

3.4.1 Introduction

Pour en revenir sur l'objectif d'amélioration des performances du code de ce chapitre, il convient de rappeler les deux volets envisagés : d'un côté l'implémentation des bibliothèques BLAS [§3.2], et d'un autre, l'étude et la mise en pratique de la nouvelle méthode des boîtes [§3.3]. Notons par ailleurs que si l'option BLAS s'est montrée décevante, des gains de performances ont été obtenus par la remise à niveau du code [§C] et l'amélioration de la gestion des segments [§2].

Une première difficulté dans l'analyse quantitative du gain en temps de calcul vient du fait qu'il varie beaucoup selon le type de configuration (nombre de segments et leurs positions, taille et nombre de boîtes, sollicitation appliquée, *etc.*). Nous avons choisi ici une approche pragmatique, en analysant le cas d'étude relativement complexe que nous avons pris comme référence pour les développements effectués sur le code au cours de ces travaux de thèse [§2.2].

Par la suite nous présentons les gains de temps obtenus tant à travers la nouvelle méthode de boîtes qu'à partir du nettoyage et améliorations de la programmation du code.

3.4.2 Impact du « nettoyage » du code

Nous comparons ici le temps de calcul entre le code « original » et deux versions différentes du code développées au cours de cette thèse [§2.7] et dénotées par :

- « DGR0 » : dernière version assurant l'identité des résultats avec le code original : pas par pas, segment par segment, jusqu'au dernier pas de calcul.
- « DGR2 » : dernière version qui assure, jusqu'à la soudaine augmentation de la densité des dislocations, une évolution similaire de la microstructure [Fig. IV-18a] et de la courbure de la latte [Fig. IV-18b].

La différence principale entre les versions DGR0 et DGR2 porte sur la gestion des interactions entre segments, qui permet par ailleurs d'atteindre sans problèmes les 7000 pas de calcul [§2.7], en évitant la très forte augmentation de la densité de dislocations obtenue avec la version originale/DGR0 [Fig. IV-18a].

La Fig. IV-18a montre l'évolution du ratio entre les temps de calcul par pas, ainsi que l'évolution du nombre de segments dans la simulation à l'intérieur et l'extérieur de la latte, alors que la Fig. IV-18b montre l'évolution de la flexion dans la latte dans le sens de la sollicitation. Sur la Fig. IV-18a on constate que, jusque vers 4000 pas de calcul, l'avantage des nouveaux codes augmente avec un nombre de segments croissant : à 3600 pas les codes DGR0 et 2 ne prennent que 24% et 7% respectivement du temps utilisé par le code original.

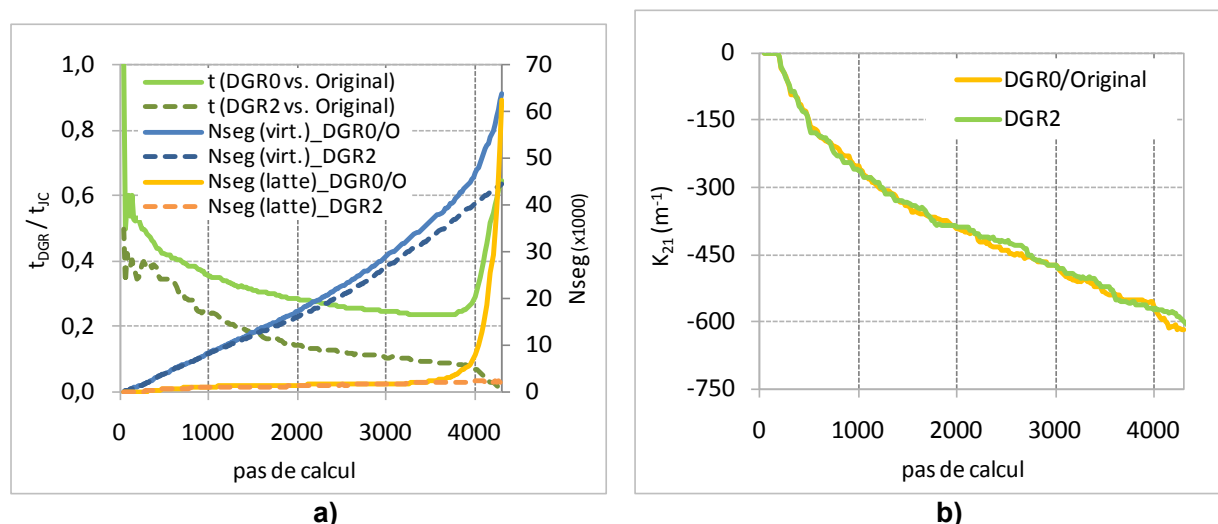


Fig. IV-18 : Comparaison des performances entre le code « original » Tridis BCC et les versions DGR0 et DGR2 : **a)** évolution du ratio du temps de calcul par segment et du nombre de segments ; **b)** évolution de la flexion dans la latte (composante 2,1 du tenseur de Nye dans le sens de la sollicitation)

Le Tableau IV-3 contient les gains de temps globaux, en précisant les grains associés aux deux tâches principales (le calcul de la contrainte et le mouvement des segments). On constate alors que la majorité de ce gain concerne le mouvement des segments, qui inclut le calcul des vitesses et la gestion des intersections/obstacles, ce qui regroupe la quasi-totalité des spécificités du code CC face aux codes CFC précédents.

La différence entre les gains à 3600 pas et 4300 pas s'explique par le poids relatif du calcul de la contrainte. En effet, la forte augmentation du nombre de segments obtenue à partir du pas 4000 [Fig. IV-18a] implique un accroissement du nombre de calculs de contrainte à courte portée (plus coûteux que les calculs de contrainte à longue portée). Le gain de temps entre la version originale et DGR0 est de plus de deux jours de calcul sur six.

		Original	DGR0	DGR2
$t(0 \rightarrow 3600)$	t (contrainte)	1,35	1,29 (-4 %)	1,47 (+9%)
	t (mouvement)	24,1	7,7 (-68%)	1,6 (-93%)
	Total	25,5	9,1 (-64%)	3,1 (-88%)
$t(0 \rightarrow 4300)$	t (contrainte)	67,4	65,1 (-3 %)	-
	t (mouvement)	82,3	28,2 (-65%)	-
	Total	149,9	93,5 (-37%)	-

Tableau IV-3 : Comparaison des performances entre le code « original » Tridis-BCC et les versions DGR0 et DGR2 : temps de calcul (heures) en fin de simulation à 3600 pas (avant le fort incrément du nombre de segments dans la simulation) et 4300 pas (en fin de simulation). On distingue ici le temps utilisé pour le calcul des contraintes de celui pour le mouvement des segments, qui constituent à eux deux plus de 99% du temps de calcul.

3.4.3 Impact de la nouvelle méthode des boîtes

Pour évaluer l'impact de la nouvelle méthode des boîtes sur le temps de calcul de simulation, nous utilisons la même simulation de référence que précédemment, avec la version notée « DGR3 ». Les différences entre DGR3 et DGR2 sont rapportées au paragraphe précédent [§2.7]. Le gain de performance illustré ici est associé uniquement à la nouvelle méthode des boîtes (NMB), par rapport à la méthode des boîtes originale (MBO).

On notera par ailleurs que les simulations réalisées avec une méthode de calcul différente ne sont évidemment plus identiques segment par segment. Nous avons cependant vérifié que dans les cas ici présentés donnaient des évolutions similaires (nombre et distribution de segments, ainsi que l'évolution de la courbure dans la latte). Nous avons donc choisi d'utiliser la version DGR3, puisqu'elle assure la stabilité de la simulation en dépit des changements des différents paramètres sélectionnés. Les temps de calcul sont divisés par le nombre de segments afin de rendre la comparaison plus pertinente.

La Fig. IV-19a montre le gain de temps de calcul global sur chaque pas de simulation, d'autant plus important que le nombre de boîtes, et donc le poids du calcul à longue portée dans l'ensemble, augmente. Dans la Fig. IV-19b on observe par ailleurs comment le temps de calcul de la contrainte à longue portée est indépendant du nombre de segments avec la NMB, mais linéaire avec la MBO [cf. Fig. IV-12].

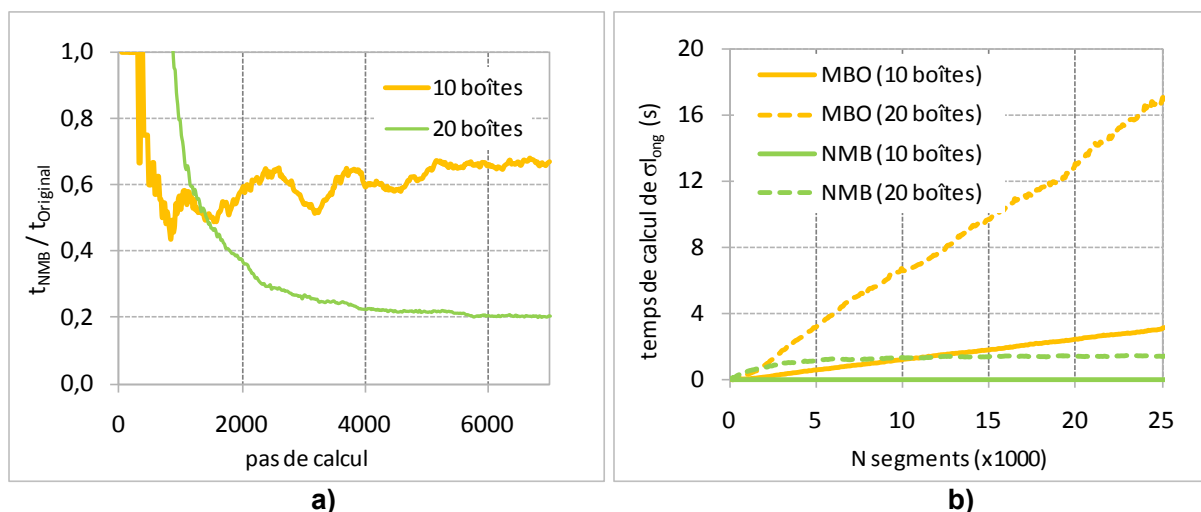


Fig. IV-19 : Gain en performances en utilisant la nouvelle méthode des boîtes (« NMB », [§3.3.2]) pour le calcul des contraintes à longue portée : **a)** Évolution du ratio des temps de calcul par pas globaux entre la NMB et la méthode des boîtes originale de Tridis (« MBO », §3.3.1) ; simulations effectuée avec 10^3 et 20^3 boîtes. **b)** Temps de calcul de la contrainte à longue portée en fonction du nombre de segments pour les deux méthodes.

Le Tableau IV-4 montre les temps en fin de simulation, en détaillant les différentes tâches principales du code. On observe alors comment la NMB permet de gagner un quart du temps de calcul lorsqu'on utilise un nombre réduit de boîtes ($N_{BOITES}=10^3$), mais son avantage est encore plus important lorsqu'on augmente ce nombre. Ainsi, en utilisant 20^3 boîtes la NMB permet de diviser le temps de calcul avec la MBO de presque moitié, soit presque un facteur 4 par rapport au cas de référence (MBO $N_{BOITES}=10^3$)

Par ailleurs, notons ici que l'utilisation d'un plus grand nombre de boîtes :

- diminue le temps de calcul relatif au déplacement des segments (car on ne recherche des obstacles que dans les boîtes premières voisines),
- Améliore la précision du calcul à longue portée puisque l'erreur des approximations multi-pôle est réduite, mais diminue celle du calcul à courte portée pourvu qu'on ne change pas le nombre de couches pour le calculer.

		MBO		NMB	
N _{BOITES}		10 ³	20 ³	10 ³	20 ³
Temps de calcul (h)	σ court	6,0	1,6	4,9	1,2
	σ long	0,3	1,6	0,0	0,2
	t (contrainte)	6,3	3,2 (-49 %)	4,9 (-22 %)	1,5 (-77 %)
	t (mouvement)	1,2	0,4	1,0	0,4
	Total	7,6	3,6 (-52%)	5,9 (-22%)	1,9 (-75%)

Tableau IV-4 : Gain en performances dans le calcul des contraintes à longue portée par la nouvelle méthode des boîtes (« NMB », [§3.3.2]) par rapport à la méthode des boîtes originale à Tridis (« MBO », §3.3.1) : détail du temps de calcul en fin de simulation (7000 pas ou 7 μs) avec 10³ et 20³ boîtes.

Finalement, rappelons que dans ces simulations de DD nous utilisons l'approximation temporelle [§3.3.1] avec $nupdateLR = 10$ (i.e. nous ne l'actualisons que tous les 10 pas), ce qui contribue à réduire le coût du calcul de la contrainte à longue portée. Or cette approximation est à l'origine d'un des critères limitant la taille minimale des boîtes dans Tridis : elle doit toujours rester suffisamment importante pour que les dislocations n'aient pas le temps de changer de boîte, avant d'actualiser le calcul (Shin, 2004).

Dans les simulations ici présentées, une dislocation se déplaçant à la vitesse maximale admise nécessite 5 pas de calcul pour parcourir une boîte, ce qui est jugé suffisant pour la valeur $nupdateLR = 10$. Bien évidemment, si l'on actualisait la contrainte à longue portée tous les pas de calcul, on pourrait choisir une taille minimale plus fine pour accélérer le calcul davantage, voir même d'optimiser cette taille en fonction de l'évolution de la microstructure en cours de simulation. Dans ce sens, la NMB offre encore un avantage, puisque contrairement à la MBO elle offre des gains de temps de calcul considérables même avec $nupdateLR = 1$ [Fig. IV-20].

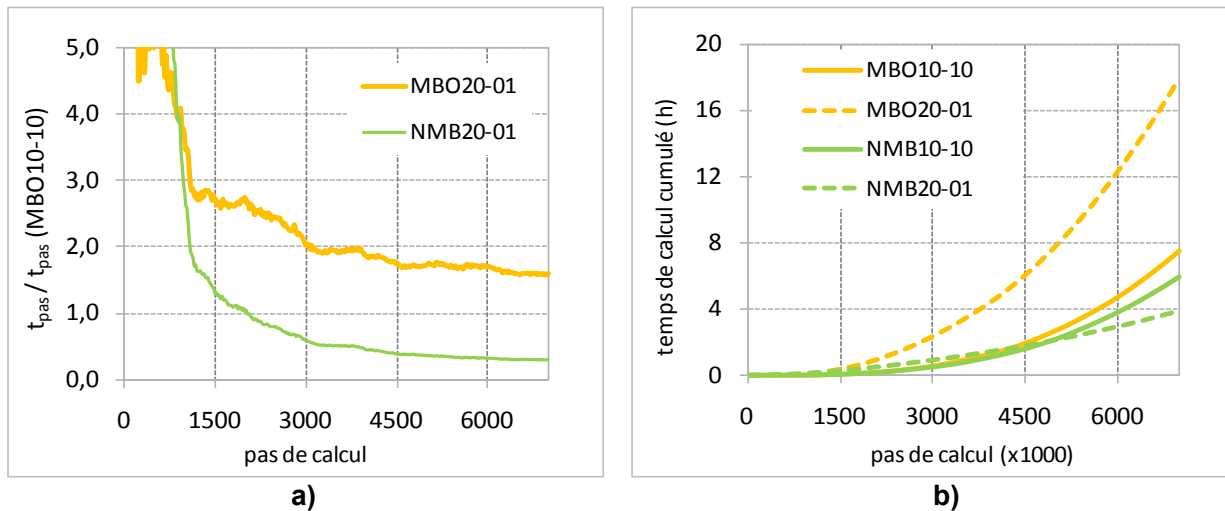


Fig. IV-20 : Gain en performances en utilisant la nouvelle méthode des boîtes (« NMB », [§3.3.2]) pour le calcul des contraintes à longue portée : simulations sans approximation temporelle [§3.3.1] (i.e. $nupdateLR = 1$). **a)** ratio des temps de calcul globaux par rapport à l'utilisation de la méthode des boîtes originale à Tridis (« MBO », §3.3.1) avec $nupdateLR=10$; **b)** Évolution du temps de calcul global avec les deux méthodes pour 10 boîtes avec une actualisation de la contrainte à longue portée tous les 10 pas de temps, et 20 boîtes sans approximation temporelle.

3.5 Discussion

Dans cette partie, deux voies permettant accélérer le code de dynamique de dislocations (DD) Tridis ont été explorées : l'utilisation des bibliothèques mathématiques BLAS [§3.2] et l'implémentation d'une nouvelle « méthode des boîtes » (NMB) pour le calcul de la contrainte à longue portée [§3.3].

Dans le premier cas, l'utilisation des bibliothèques mathématiques s'est révélée contreproductive, puisque le temps de calcul augmente lorsqu'on fait appel à BLAS [§3.2.2]. Nous avons toutefois exploré l'intérêt de ces bibliothèques dans d'autres cas de figure, avec des calculs matriciels de grande taille [§3.2.3]. En termes de performances, l'utilisation de BLAS devient alors intéressante sur notre cluster de calcul lorsqu'on utilise le compilateur libre *gcc*, mais les temps de calcul ainsi obtenus restent toutefois supérieurs à ceux obtenus en utilisant le compilateur commercialisé par *The Portland Group* sans BLAS [Fig. IV-11].

En ce qui concerne le calcul des contraintes à longue portée, nous avons montré la pertinence de la NMB pour les codes de DD [§3.3.2], avec un temps de calcul indépendant du nombre de segments [Fig. IV-19b] qui permet de diminuer le temps global de manière conséquente [Tableau IV-4 et Fig. IV-19] pour une erreur limitée (toujours inférieur à 5-6%, §3.3.2.3).

Nous avons par ailleurs identifié deux points susceptibles d'apporter des gains en performance supplémentaires et significatifs en utilisant la méthode des boîtes.

- D'une part, étant donné que le calcul du tenseur de Nye de chaque boîte est indépendant des autres, cette méthode devrait être facilement parallélisable notamment sur des architectures à mémoire partagée (de type Openmp).
- D'autre part, pour exploiter les améliorations du calcul à longue portée, il faudrait compléter ce travail en optimisant dynamiquement la taille des boîtes au cours de la simulation en fonction du développement de la microstructure (en fonction d'une estimation de l'erreur maximale admissible, par exemple). Ainsi modifiée, les performances de la NMB devraient permettre de réduire l'approximation temporelle réalisée dans la méthode de boîtes originale de Tridis [§3.3.1] tout en raffinant la taille des boîtes.

Finalement, nous avons démontré l'intérêt de disposer d'un code mieux documenté et structuré [§Annexe C]. Cette première étape a permis d'éliminer de nombreuses redondances tout en garantissant la reproductibilité des résultats avec le code précédent. Ces changements ont permis de diviser par deux le temps total de calcul pour des simulations qui pouvaient auparavant durer une semaine [§3.4.2]. Dans un deuxième temps, ce travail a permis d'identifier et combler des lacunes dans le code [§2], dont la dernière version permet avec la NMB de réaliser en moins de deux heures [Tableau IV-4, temps à 7000 pas] une simulation qui prenait initialement plus d'une journée [Tableau IV-3, temps à 3600 pas].

4 Conclusion

Dans ce chapitre nous avons présenté deux **améliorations apportées au code de dynamique de dislocations Tridis-BCC** développé par (Shigesato, 2007, Chaussidon, 2007) :

- l'amélioration de la gestion des segments de dislocation [§2],
- l'amélioration des performances du code [§3].

En ce qui concerne la **gestion des mouvements des segments de dislocation**, nous avons d'abord supprimé les discontinuités dans les lois de mobilité [§2.4.2], puis programmé une gestion plus exhaustive des intersections possibles entre segments [§2.5], et finalement en introduit deux pas de temps distincts pour les segments vis et coin [§2.6]. Ces changements ont permis d'éviter les instabilités constatées dans les simulations de Chaussidon [§2.7].

Les simulations de Chaussidon nécessitant parfois de plusieurs semaines de calcul, nous avons tenté d'améliorer **les performances du code**. Ce travail a porté essentiellement sur deux actions : l'utilisation des bibliothèques mathématiques BLAS [§3.2] et l'introduction d'un nouvel algorithme pour le calcul des contraintes à longue portée [§3.3]. Seul ce dernier point s'est avéré rentable [§3.4.3]. Remarquons au passage, que les améliorations apportées dans la gestion des segments a également permis de réaliser des gains de temps considérables [§3.4.2]. Ainsi, la nouvelle version du code Tridis-BCC_v2.0 permet désormais de mener des simulations qui pouvaient prendre plus d'une semaine en seulement quelques heures [§3.4.3].

Par ailleurs, tout au long de cette démarche nous avons essayé de rendre Tridis-BCC **aussi flexible que possible** [§C-6], afin d'en faire un outil numérique pouvant être utilisé pour explorer plusieurs types de simulations, ainsi que différents algorithmes. Comme nous le verrons par la suite, nous avons largement utilisé ces nouvelles fonctionnalités pour étudier, entre autres, la **validité de la nouvelle loi de mobilité des dislocations vis** [§V].

Tous les développements du code TRIDIS-BCC sont disponibles sur le serveur CVS [*Concurrent Versions System* (Grune, 1986, Berliner, 1990)] mis en place au CEA de Saclay et avec un accès au laboratoire SIMAP-GPM2 de Grenoble INP.

5 Références

- ACKLAND, G. J., MENDELEV, M. I., SROLOVITZ, D. J., HAN, S. & BARASHEV, A. V. 2004. Development of an interatomic potential for phosphorus impurities in alpha-iron. *Journal of Physics-Condensed Matter*, 16, S2629-S2642.
- BERLINER, B. 1990. CVS II: parallelizing software development. *Proceedings of the Winter 1990 USENIX Conference/Proceedings of the Winter 1990 USENIX Conference*, 341-52|xvi+374.
- CAILLARD, D. 2009. TEM in situ straining experiments in Fe at low temperature. *Philosophical Magazine Letters*, 89, 517-526.
- CHAUSSIDON, J. 2007. *Etude multiéchelle de la plasticité du fer alpha à basse température*. Doctorat de l'INP Grenoble Thesis (PH D), Grenoble INP - ED "Matériaux et Génie des Procédés".
- CHAUSSIDON, J., FIVEL, M. & RODNEY, D. Year. The glide of screw dislocations in bcc Fe: Atomistic static and dynamic simulations. *In*, 2006. Pergamon-Elsevier Science Ltd, 3407-3416.
- CHAUSSIDON, J., ROBERTSON, C., FIVEL, M. & MARINI, B. 2010. Internal stress evolution in Fe laths deformed at low temperature analysed by dislocation dynamics simulations. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 18, 14.
- CHRISTIAN, J. W. 1983. SOME SURPRISING FEATURES OF THE PLASTIC-DEFORMATION OF BODY-CENTERED CUBIC METALS AND ALLOYS. *Metallurgical Transactions a-Physical Metallurgy and Materials Science*, 14, 1237-1256.
- DARRIGRAND, E. 2002. *Couplage méthodes multipôles - discrétisation microlocale pour les équations intégrales de l'électromagnétisme*. Docteur Thesis (PH D), Université de Bordeaux I - ED "Mathématiques et informatique".
- DOMAIN, C. & MONNET, G. 2005. Simulation of screw dislocation motion in iron by molecular dynamics simulations. *Physical Review Letters*, 95, 4.
- FIVEL, M. 2008. *Simulations de la plasticité cristalline et transition d'échelles*. Mémoire d'Habilitation à Diriger les Recherches, Université Joseph Fourier.
- GRUNE, D. 1986. Concurrent Versions System, A Method for Independent Cooperation. Amsterdam: Vrije Universiteit de Boelelaan.
- KEH, A. S. & NAKADA, Y. 1967. PLASTICITY OF IRON SINGLE CRYSTALS. *Canadian Journal of Physics*, 45, 1101-&.
- KEH, A. S. & NAKADA, Y. 1968. YIELDING PLASTIC FLOW AND DISLOCATION SUBSTRUCTURE IN IRON SINGLE CRYSTALS. *Transactions of the Japan Institute of Metals*, S 9, 876-&.
- KUBIN, L. P., CANOVA, G., CONDAT, M., DEVINCRE, B., PONTIKIS, V. & BRECHET, Y. 1992. Dislocation microstructures and plastic flow: a 3D simulation. *Diffusion and Defect Data - Solid State Data, Part B (Solid State Phenomena)*, 23-24, 455-472.
- LAWSON, C. L., HANSON, R. J., KINCAID, D. R. & KROGH, F. T. 1979. Basic linear algebra subprograms for Fortran usage. *ACM Transactions on Mathematical Software*, 5, 308-323.
- LI, J. C. M. 1964. STRESS FIELD OF DISLOCATION SEGMENT. *Philosophical Magazine*, 10, 1097-&.
- LOUCHET, F. 1976. *Plasticité des métaux de structure cubique centrée à basse température : déformation "in situ" par microscopie électronique à haute tension*. Doctorat Thesis (PH D), Université de Toulouse.
- MARIAN, J., CAI, W. & BULATOV, V. V. 2004. Dynamic transitions from smooth to rough to twinning in dislocation motion. *Nature Materials*, 3, 158-163.
- MENDELEV, M. I., HAN, S., SROLOVITZ, D. J., ACKLAND, G. J., SUN, D. Y. & ASTA, M. 2003. Development of new interatomic potentials appropriate for crystalline and liquid iron. *Philosophical Magazine*, 83, 3977-3994.
- NAAMANE, S. 2008. *Etude de la déformation plastique de la ferrite à basse température: simulations de dynamique des dislocations*. Doctorat de l'Université Pierre et Marie Curie Thesis (PH D), Université Pierre et Marie Curie.
- NYE, J. F. 1953. SOME GEOMETRICAL RELATIONS IN DISLOCATED CRYSTALS. *Acta Metallurgica*, 1, 153-162.
- PEACH, M. & KOEHLER, J. S. 1950. THE FORCES EXERTED ON DISLOCATIONS AND THE STRESS FIELDS PRODUCED BY THEM. *Physical Review*, 80, 436-439.

- QUESNEL, D. J., SATO, A. & MESHII, M. 1975. SOLUTION SOFTENING AND HARDENING IN IRON-CARBON SYSTEM. *Materials Science and Engineering*, 18, 199-208.
- QUEYREAU, S. 2008. *Étude des Mécanismes d'Écrouissage Sous Irradiation de la Ferrite par Simulations de Dynamique de Dislocations*. Doctorat de l'Université Pierre et Marie Curie Thesis (PH D), Université Pierre et Marie Curie.
- SCHMID, E. & BOAS, W. 1950. *Plasticity of crystals : with special reference to metals*, London, F.A. Hughes.
- SHIGESATO, G. 2007. *Development of dislocation structures in steels: Relation with the mechanical properties*. Doctorat de l'INP Grenoble Thesis (PH D), Grenoble INP - ED "Matériaux et Génie des Procédés".
- SHIN, C. 2004. *3D Discrete Dislocation Dynamics applied to dislocation-precipitate interactions*. Doctorat de l'INP Grenoble Thesis (PH D), Grenoble INP - ED "Matériaux et Génie des Procédés".
- SPITZIG, W. A. 1973. EFFECTS OF ORIENTATION, TEMPERATURE AND STRAIN RATE ON DEFORMATION OF FE-0.16 WT PERCENT TI SINGLE-CRYSTALS. *Materials Science and Engineering*, 12, 191-202.
- SPITZIG, W. A. & KEH, A. S. 1970a. EFFECT OF ORIENTATION AND TEMPERATURE ON PLASTIC FLOW PROPERTIES OF IRON SINGLE CRYSTALS. *Acta Metallurgica*, 18, 611-&.
- STEIN, D. F. 1966. EFFECT OF CARBON ON STRAIN-RATE SENSITIVITY OF IRON SINGLE CRYSTALS. *Acta Metallurgica*, 14, 99-&.
- TAKEUCHI, S., FURUBAYA.E & TAOKA, T. 1967. ORIENTATION DEPENDENCE OF YIELD STRESS IN 4.4 PERCENT SILICON IRON SINGLE CRYSTALS. *Acta Metallurgica*, 15, 1179-&.
- VERDIER, M., FIVEL, M. & GROMA, I. 1998. Mesoscopic scale simulation of dislocation dynamics in fcc metals: Principles and applications. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 6, 755-770.
- WEYGAND, D., FRIEDMAN, L. H., VAN DER GIESSEN, E. & NEEDLEMAN, A. 2001. Discrete dislocation modeling in three-dimensional confined volumes. *Materials Science and Engineering a-Structural Materials Properties Microstructure and Processing*, 309, 420-424.

Chapitre V : Une nouvelle loi de mobilité pour les dislocations vis dans le fer CC

Table des matières

Chapitre V : Une nouvelle loi de mobilité pour les dislocations vis dans le fer CC.....		119
1	Introduction.....	121
2	La limite à forte contrainte	122
2.1	Introduction	122
2.2	Le modèle basé sur l'analyse de Hirth et Lothe.....	123
2.2.1	Introduction.....	123
2.2.2	Equations générales du modèle.....	123
2.2.3	Etude de la dépendance avec la longueur L de la dislocation	124
2.2.4	Comparaison avec les modèles précédents	125
2.2.5	Comparaison avec les mesures expérimentales	126
2.3	Le modèle hybride H&L – G&D	127
2.3.1	Introduction.....	127
2.3.2	Comparaison avec les autres modèles.....	128
2.4	Discussion	129
3	La limite à haute température.....	130
3.1	Introduction	130
3.2	Motivation de la démarche	132
3.3	Une nouvelle loi de mobilité avec $\Delta G(\tau, T)$	133
3.3.1	Expression générale de la loi	133
3.3.2	Expression de l'énergie d'activation.....	133
3.3.3	L'ajustement des paramètres.....	134
3.3.4	Comparaison avec le modèle de Kocks	135
3.3.4.1	Comparaison analytique	135
3.3.4.2	Comparaison avec l'expérience	137
3.4	Discussion	139
3.4.1	Introduction.....	139
3.4.2	De la nature physique de la nouvelle loi	139
3.4.3	Implications de la considération d'un terme entropique	141
3.4.3.1	Analyse générale	141
3.4.3.2	La contrainte critique τ_0 dans l'ajustement de ΔG	142
3.4.3.3	Considérations sur le mouvement saccadé à faible température.	143
3.5	Simulations en dynamique de dislocations	144
3.5.1	Dépendance en température de la contrainte d'écoulement.....	144
3.5.2	Sauts de vitesse de déformation	145
4	Simulations du comportement en flexion d'une latte de ferrite par DD.....	147
4.1	Illustration du sens de l'asymétrie maillage/anti-maillage.....	147
4.1.1	Introduction.....	147
4.1.2	Simulations et comparaison à l'expérience.....	147
4.1.2.1	Basse température (77K)	148
4.1.2.2	Haute température (293K)	148
4.2	Evolution de la contrainte interne lors de la flexion d'une latte de ferrite.....	150
4.2.1	Introduction.....	150
4.2.2	Résultats et discussion	151
5	Conclusion	154
6	Références.....	156

1 Introduction

Dans le Chapitre III nous avons souligné l'importance de disposer d'une loi de mobilité des dislocations vis capable de relier de façon continue les régimes thermique et athermique. Nous avons alors détaillé les différents modèles théoriques disponibles, dont celui des doubles décrochements (Dorn and Rajnak, 1964, Guyot and Dorn, 1967, Hirth and Lothe, 1982) et celui de « *locking et unlocking* » (Caillard and Martin, 2003d). Nous avons également souligné les difficultés numériques, en dynamique de dislocations (DD), observées à l'approche du régime de transition. Nous tenterons de surmonter ces difficultés, en proposant différents types de modifications.

Dans ce chapitre, nous supposerons que dans le régime athermique, les dislocations (vis et coin) possèdent une mobilité de type visqueuse. Ainsi, pour une contrainte ou température suffisamment élevées, on considère que l'activation thermique n'intervient plus et que la mobilité des dislocations est limitée par le mécanisme de friction visqueuse, comme dans les alliages de fer CFC, i.e. :

$$v_{vis}^{ath} \approx v_{coin} = \frac{\tau b}{B} \quad (5.1)$$

Il n'y a aucune raison physique pour que le coefficient de friction (B) soit le même pour les dislocations vis et pour les dislocations coin [§III-2.4]. Ce point particulier n'est pas traité dans ce chapitre : nous conserverons cette approximation par simplicité. La question à laquelle nous tenterons de répondre est donc : **comment relier de façon continue la mobilité thermiquement activée (3.15) à celle de la mobilité de type athermique** décrite par l'équation (5.1).

Dans un premier temps [§2], nous revisiterons l'essentiel des travaux précédents, en se focalisant sur la transition vers le régime athermique à forte contrainte. Nous utiliserons d'abord le modèle de Hirth et Lothe [§III-3.2.3], qui introduit une dépendance en contrainte du terme pré-exponentiel, ainsi que la notion de libre parcours moyen des double décrochements. Les idées de base de ce modèle, fondé sur la théorie de la diffusion, seront ensuite utilisées pour améliorer le modèle vibrationnel de Guyot et Dorn [§III-3.2.2]. Dans les deux cas, nous utiliserons une énergie d'activation obtenue par une nouvelle méthode d'ajustement, adaptée à notre problématique [§B].

Dans un deuxième temps [§3], nous abordons la transition vers le régime athermique, à haute température. C'est sans doute la partie la plus originale, voire controversée de ce mémoire. Nous serons alors amenés à revoir un grand nombre de positions bien établies, notamment sur la possibilité d'utiliser la théorie classique de l'activation thermique pour déduire une loi de mobilité microscopique d'une dislocation isolée. On présentera alors une nouvelle loi de mobilité faisant intervenir un terme entropique, dont la seule justification physique est de parfaitement bien reproduire les résultats expérimentaux. Ce dernier point sera non seulement abordé analytiquement mais aussi à travers des simulations en dynamique de dislocations [§3.5] réalisées avec le code Tridis-BCC développé dans ce mémoire [Chapitre IV].

Finalement, nous présenterons deux exemples d'application du nouveau code, utilisant les différentes lois de mobilité ici développées : le premier illustre les caractéristiques du glissement dévié à basse et haute température [§4.1], et le deuxième concerne l'étude du clivage de l'acier de cuve, dans la continuité des travaux de Chaussidon (2007, 2010) [§4.2].

2 La limite à forte contrainte

2.1 Introduction

Au Chapitre III, il a été montré que les simulations DD menées jusqu'à ce jour (sur des matériaux à forte énergie de Peierls) utilisent le modèle vibrationnel de Guyot et Dorn, pour décrire la mobilité des dislocations vis [G&D, §III-3.2.2] (Tang *et al.*, 1998, Shigesato, 2007, Chaussidon, 2007, Naamane, 2008). Or, ce modèle implique que la vitesse des décrochements est infinie par rapport à celle de la ligne vis. Cette description est irréaliste à forte contrainte, puisque plusieurs événements de nucléation peuvent se produire le long d'une ligne vis donnée, avant la propagation complète des double-décrochements individuels.

Dans tous les cas, le mode de propagation des dd est donné de manière indépendante de leur mode de nucléation. Il est donc possible d'utiliser le critère de nucléation de Guyot et Dorn, tout en l'intégrant dans le formalisme de Hirth et Lothe. Nous appellerons ce nouveau formalisme « **modèle hybride de Hirth et Lothe – Guyot et Dorn** » (noté « H&L – G&D » par la suite), dont le sens physique nous paraît plus simple, et l'application en DD plus aisée [§2.3].

Au Chapitre III, il est également montré qu'il n'existe aucune expression analytique de l'énergie d'activation capable de couvrir tout le domaine de la transition. Pour les deux modèles retenus, et comme l'ont fait les travaux précédents, nous recourrons à un ajustement empirique par une loi de Kocks [cf. eq.(3.76)], à partir de mesures expérimentales de la variation de la limite d'élasticité avec la température, à vitesse de déformation constante [§III-3.2.4.5]. Dans l'Annexe B nous analysons plus en détail la pertinence d'utiliser les mesures sur l'acier de cuve ou sur des monocristaux, et nous introduisons une nouvelle approche d'ajustement visant à réduire le nombre de choix *ad-hoc* nécessaires. Le Tableau V-1 montre l'ajustement réalisé à partir des mesures sur des monocristaux de fer retenus pour la suite de notre étude, et le compare aux ajustements utilisés dans les codes de dynamique de dislocations précédents [§III-3.6.3].

	τ_o (Mpa)	ΔH_o (eV)	p	q
Chaussidon (2007)	210	0.93	0.52	1.80
Naamane (2008)	363	0.84	0.5	1
Nouvel ajustement	359	0.761	0.593	1.223

Tableau V-1 : Paramètres d'ajustement par une loi de Kocks de l'énergie d'activation pour la mobilité thermiquement activée des dislocations vis dans le fer CC : comparaison du nouvel ajustement à partir des mesures de la limite d'élasticité sur des monocristaux de fer [§B-5] avec ceux utilisés dans les études précédents en dynamique de dislocations [§III-3.6.3].

2.2 Le modèle basé sur l'analyse de Hirth et Lothe

2.2.1 Introduction

Nous présentons ici une nouvelle expression de loi de mobilité des dislocations vis dans le fer CC, inspirée du modèle de H&L (1982), dont le principal apport est l'amélioration de la prise en compte du régime à forte contrainte. Les détails du modèle de H&L sont décrits en §III-3.2.3. Nous nous limiterons ici à rappeler les principaux concepts et équations.

La différence principale concerne l'utilisation d'une énergie d'activation (ΔG) ajustée de façon empirique [§Tableau V-1], ayant pour but d'étendre la validité du modèle à une plus vaste plage en contraintes et températures. Il faut cependant garder à l'esprit que certaines grandeurs intervenant dans le terme pré-exponentiel, telles que la largeur critique d'un double décrochement (l_c), sont issues de l'analyse de l'énergie d'activation à faible contrainte.

Pour rappel, la configuration particulière des atomes dans les cristaux de fer CC engendre un potentiel de Peierls très élevé pour les dislocations vis, qui doivent vaincre ce relief énergétique pour avancer dans le réseau. Dans les modèles de doubles décrochements (dd), on considère le mouvement d'une dislocation comme une suite de sauts élémentaires entre les vallées de Peierls correspondant au minimum du potentiel. Ces sauts élémentaires se font en deux étapes :

- La « **nucléation** » d'un dd, dans laquelle une petite partie de la ligne réussit à franchir la barrière du potentiel. C'est l'étape que l'on considère assistée en même temps par la contrainte appliquée sur la ligne et par les fluctuations thermiques des atomes (5.3).
- La « **propagation** » d'un dd le long de la ligne sous l'effet de la contrainte appliquée. On considère que ce mouvement de segments perpendiculaires à la dislocation vis, n'est pas influencé par le relief de Peierls, et on néglige l'influence de l'activation thermique. La vitesse v_d des décrochements peut alors être décrite par une loi visqueuse (5.1), similaire à celle utilisée pour les dislocations coin.

2.2.2 Equations générales du modèle

La Fig. V-1 illustre la configuration de base de notre modèle, prenant en compte la possibilité de germination multiple, le long d'une ligne donnée. La vitesse de la dislocation (5.2) est alors proportionnelle au nombre de nucléations des dd (J) et à leur libre parcours moyen (X), qui dépend de la vitesse de propagation des décrochements (v_d).

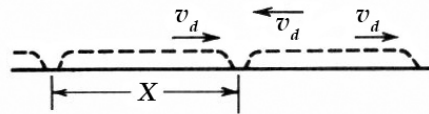


Fig. V-1 : Annihilation de doubles décrochements après un libre parcours moyen X [§III-3.2.3]

Ainsi, la vitesse des vis (v_{vis}) en fonction de la contrainte effectivement appliquée sur la ligne (τ^*) et la température (T) peut s'écrire :

$$v_{vis} = hJX \quad (5.2)$$

où :

- h : distance entre vallées de Peierls [m] ;
- $J(\tau^*, T)$: taux de nucléation de dd par unité de longueur [$\text{m}^{-1} \text{s}^{-1}$] ;
- $X(\tau^*, T)$: libre parcours moyen d'un dd avant annihilation avec un autre dd [m].

Le terme J (5.3) dépend de l'énergie d'activation (ΔG), décroissante avec la contrainte τ^* . A forte température ou contrainte, l'influence de la barrière devient négligeable et l'exponentielle de l'expression (5.3) tend vers 1. On obtient alors un terme proportionnel à v_d , décrivant un mouvement de type visqueux, similaire à celui des dislocations coin. Le facteur

de proportionnalité dépend de la longueur critique d'un dd (l_c , minimum nécessaire pour que la nucléation soit effective) et d'un facteur correcteur (λ_s) de l'ordre de l'unité, dont l'origine est explicitée en §III-3.2.3.

$$J = \frac{v_d}{\lambda_s l_c^2} \cdot \exp\left(-\frac{\Delta G(\tau^*)}{k_B T}\right) \quad (5.3)$$

avec :

$$- \quad v_d : \text{vitesse des décrochements [m/s]} ; \quad v_d = \frac{\tau^* b}{B} \quad (5.4)$$

$$- \quad l_c : \text{longueur critique d'un dd} ; \quad l_c = \left(\frac{\mu b h}{8\pi\tau^*}\right)^{1/2} \quad (5.5)$$

$$- \quad \lambda_s : \text{correction de Seeger-Schiller (1962)} ; \quad \lambda_s = \left(\frac{\tau^* \mu b^3 h^3}{8\pi k_B^2 T^2}\right)^{1/4} \quad (5.6)$$

- μ : module de cisaillement [Pa] ;
- b : module du vecteur de Burgers [m] ;
- k_B : constante de Boltzmann [J K⁻¹] ;
- τ^* : contrainte effective appliquée sur la dislocation [Pa].

L'expression (5.7) relie X au libre parcours moyen des dd dans une ligne infinie (X_∞), qui peut lui-même être décrit simplement, à partir de v_d et J (5.8).

$$X = X_\infty \cdot \frac{L}{X_\infty + L} \quad (5.7)$$

avec

- L : longueur de la dislocation ;
- X_∞ : libre parcours moyen pour une ligne de longueur infinie

$$X_\infty = 2 \left(\frac{v_d}{J}\right)^{1/2} = 2 l_c \lambda_s^{1/2} \exp\left(\frac{\Delta G(\tau^*)}{2k_B T}\right) \quad (5.8)$$

2.2.3 Etude de la dépendance avec la longueur L de la dislocation

Tel que discuté en §III-3.2.3 à partir de l'équation (5.7), il existe 2 cas limites, selon que L est très supérieure ou inférieure à X_∞ (5.8). On distingue ainsi le cas à faible contrainte, qui conserve la linéarité en L des formulations traditionnelles du régime thermique et le cas à forte contrainte, où la vitesse devient indépendante de L , comme en régime visqueux ou athermique :

- aux fortes contraintes ($L \gg X_\infty$), on trouve la vitesse d'une ligne infinie [§III-3.2.3.1]:

$$X = \lim_{L \gg X_\infty} \frac{X_\infty L}{X_\infty + L} \approx X_\infty \Rightarrow v_{vis} = h X_\infty J = v_d \frac{2}{\lambda_s^{1/2}} \frac{h}{l_c} \cdot \exp\left(-\frac{\Delta G}{2k_B T}\right) \quad (5.9)$$

- aux faibles contraintes ($L \ll X_\infty$), l'expression de la vitesse est linéaire en L :

$$X = \lim_{L \ll X_\infty} \frac{X_\infty L}{X_\infty + L} \approx L \Rightarrow v_{vis} = h L J = v_d \frac{1}{\lambda_s} \frac{h L}{l_c^2} \cdot \exp\left(-\frac{\Delta G}{k_B T}\right) \quad (5.10)$$

La Fig. V-2 illustre la transition entre ces deux cas limites, en fonction de la contrainte et de la température. La forme exacte de cette transition dépend évidemment du choix de $\Delta G(\tau^*)$ [Tableau V-1].

En Fig. V-2a la courbe noire trace le ratio entre la vitesse d'une dislocation de longueur L et celle d'une dislocation de référence, dans le régime à faible contrainte ($0,2\tau_o$). Ce ratio est parfaitement linéaire avec L , tel que le décrit l'équation (5.10). Lorsqu'on s'approche de la contrainte critique ($\tau^* = \tau_o$) en revanche, toutes les vitesses ont la même valeur (le ratio est toujours 1), indépendamment de la longueur des dislocations [cf. eq.(5.9)]. Entre ces deux cas extrêmes, la transition se fait de manière progressive, selon les courbes tracées avec $\tau^* = 0.4\tau_o$, $\tau^* = 0.6\tau_o$ et $\tau^* = 0.8\tau_o$.

La Fig. V-2b illustre l'effet de la température pour un cas précis de la Fig. V-2a, celui où $L = L_{max}/10$. La dépendance linéaire en longueur est définie pour la valeur 0,1 du ratio des vitesses, et l'indépendance par sa valeur unité. On constate alors que pour une température donnée, la transition en contrainte se fait de manière continue. L'augmentation de la température a pour effet d'amorcer cette transition pour des contraintes plus faibles. Remarquons toutefois que même à des températures plus élevées ($T = 350K \approx T_{at}$), l'indépendance de la loi de vitesse par rapport au terme L est obtenue pour des contraintes relativement fortes ($\tau \approx 0.4\tau_o$). Ce point sera commenté plus en détails dans le paragraphe suivant [§3]

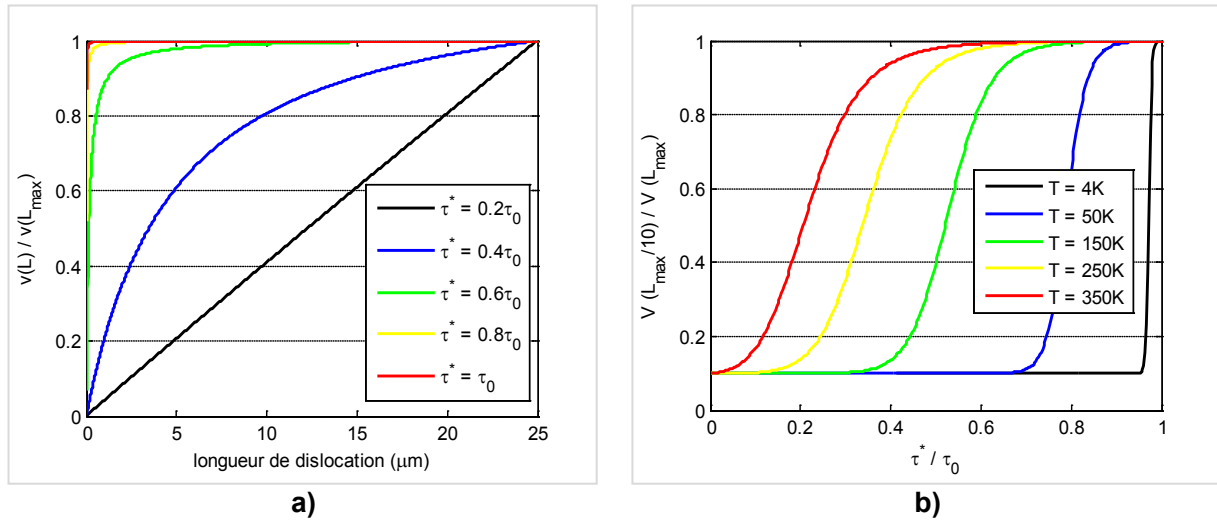


Fig. V-2 : Mobilité en fonction de la longueur de la dislocation vis (L), selon le modèle de Hirth et Lothe (5.2) (1982) : **a)** variation avec la contrainte à $T=200K$: on évalue le ratio entre la vitesse pour une dislocation de longueur $L < L_{max}$ avec une longueur de référence ($L_{max} \approx 25\mu m$). **b)** effet de la température : on évalue pour différentes températures le ratio des vitesses entre deux dislocations dont la longueur diffère d'un ordre de grandeur pour $\tau < \tau_o$.

2.2.4 Comparaison avec les modèles précédents

Pour comparer les deux modèles DD précédemment utilisés (Chaussidon, 2007, Naamane, 2008) [cf. §III-3.6] avec le nouveau modèle (H&L), nous utiliserons le même coefficient de friction visqueuse (B) et la même énergie d'activation $\Delta G(\tau)$. La Fig. V-3 montre le comportement de ces trois modèles à $T = 200K$ et pour trois longueurs de dislocation différentes, en utilisant la valeur de $B = 34.10^{-5} Pa.s$ et l'ajustement empirique de $\Delta G(\tau)$ retenu dans l'Annexe B [Tableau V-1]. Pour simplifier les équations, la correction de Seeger-Schiller (1962) $\lambda_s = 1$.

Le premier constat découlant la Fig. V-3 est bien évidemment l'inadéquation des modèles précédents, à forte contrainte. En effet, ils conservent tous deux la proportionnalité en L , ce qui n'est pas conforme aux observations, surtout lorsque la contrainte approche de τ_o . Cet inconvénient est évité avec le nouveau modèle, pour lequel on retrouve une transition continue (voir paragraphe précédent).

En comparant les modèles de Chaussidon et Naamane, on observe également l'impact de leurs pré-facteurs (constants) respectifs, qui diffèrent de 4 ordres de grandeur [Tableau III-12]. A 200K par exemple, Naamane prédit une contrainte appliquée de l'ordre de quelques dizaines

de MPa et de ce fait, les vitesses données par cette loi deviennent irréalistes dès $\tau_o/2$ environ. Ceci peut ne poser aucun problème pourvu que les vitesses de déformation restent à l'intérieur de la gamme pour laquelle le terme pré-exponentiel a été ajusté, et tant que la contrainte interne reste négligeable par rapport à la contrainte appliquée.

Une troisième différence remarquable entre le nouveau modèle (H&L) et les 2 précédents est le changement de pente, qui intervient dès lors que $L \gg X_\infty$. Ce changement mis en évidence par les équations (5.9) et (5.10), est appréciable dès 150MPa environ (voir Fig. V-3b).

Par ailleurs, contrairement aux modèles de Chaussidon et Naamane, dont la vitesse est saturée pour $\tau = \tau_o$, le nouveau modèle tend vers $\sim v_{coin}$. Notons que le régime de saturation du modèle de Naamane n'est pas visible sur les courbes de la Fig-5, puisqu'elle n'intervient que pour des vitesses supérieures à 10^6 m/s.

Finalement, on notera que le facteur pré-exponentiel du nouveau modèle est bien plus important que celui utilisé par Chaussidon, mais bien inférieur à celui proposé par Naamane [Fig. V-3b] et ce, même à faible contrainte.

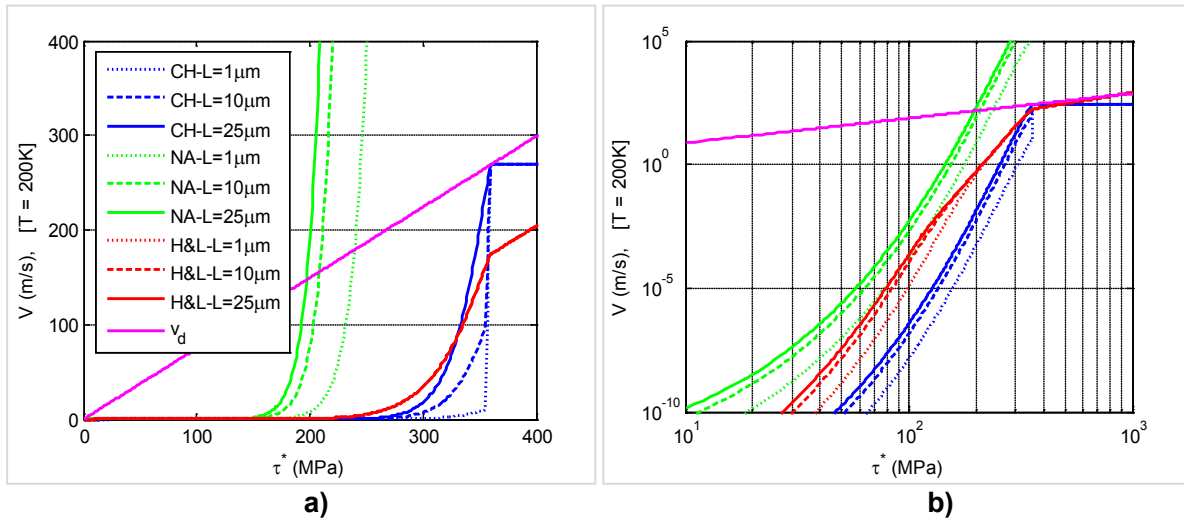


Fig. V-3 : Mobilité des dislocations vis dans le fer CC : comparaison entre le nouveau modèle basé sur H&L [§2.2.2], celui de Chaussidon (CH), et celui de Naamane (NA) [§III-3.6]. Analyse pour trois longueurs L de dislocation à $T=200K$ et en utilisant les mêmes valeurs de B et $\Delta G(\tau)$ dans les trois cas. **a)** échelle linéaire ; **b)** échelle logarithmique.

2.2.5 Comparaison avec les mesures expérimentales

Avec le nouveau modèle, inspiré de l'approche H&L, la mobilité des dislocations vis à forte contrainte répond qualitativement au comportement attendu. Il reste maintenant à vérifier que les vitesses ainsi prédites restent réalistes (ou pas). Nous avons donc comparé le nouveau modèle aux mesures expérimentales de vitesses des dislocations dans le fer pur, réalisées par Urabe et Weertman (1975) [Fig. V-4]. Nous avons choisi d'effectuer une première comparaison pour $T=300K$.

Les courbes tracées en Fig. V-4 sont déterminées à partir du modèle complet (avec correction de Seeger-Schiller), en posant $v_d = v_{coin}$ (vitesse dd = vitesse des dislocations coin). On observe alors que la vitesse des dislocations vis en régime athermique est, pour $\tau = \tau_o$, tout à fait comparable aux données expérimentales. Toutefois, la dépendance en τ du terme pré-exponentiel est plus forte que celle mesurée par Urabe et Weertman, en régime visqueux [cf. eq.(5.1)]. De plus, il existe une nette différence de mobilité (7 ordres de grandeur à 1 MPa) entre les prédictions du modèle et les mesures réalisées à faible contrainte $\tau \ll \tau_o$. Ce point sera examiné en détails, au paragraphe suivant [§3].

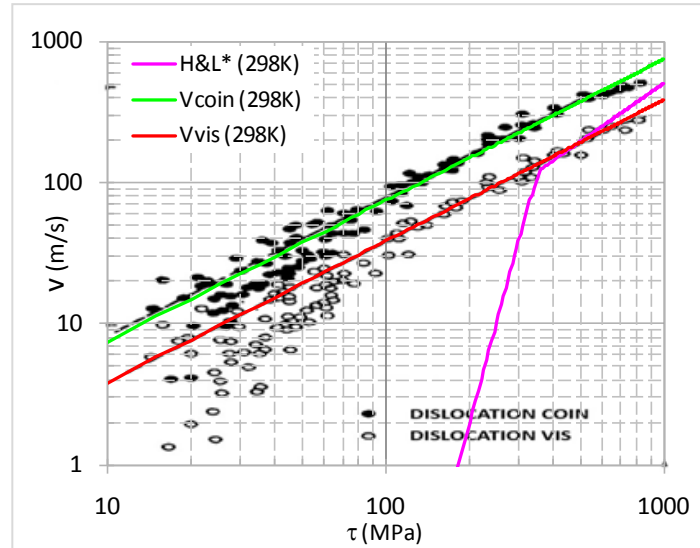


Fig. V-4 : Mobilité des dislocations vis dans le fer CC à 298K : comparaison entre les mesures expérimentales d'Urabe et Weertman (1975) et les prédictions du nouveau modèle basé sur l'analyse de Hirth et Lothe [§2.2.2].

2.3 Le modèle hybride H&L - G&D

2.3.1 Introduction

En utilisant le modèle basé sur l'analyse de Hirth et Lothe (1982) et les équations en §2.2.2, il est possible de décrire convenablement la transition vers le régime visqueux, à forte contrainte. Le modèle proposé présente également quelques inconvénients, dont notamment :

- la complexité du modèle physique de nucléation, faisant intervenir la théorie de la diffusion,
- le terme pré-exponentiel est obtenu à partir d'un raisonnement à faible contrainte.

Nous avons alors tenté de réintroduire le modèle vibrationnel de Guyot et Dorn (1967), en incluant un terme pré-exponentiel qui ne dépend de la contrainte que par l'intermédiaire de la longueur critique d'un double décrochement (l_c).

On peut alors construire un modèle combinant les aspects fondamentaux de ces deux études, ici appelé « modèle hybride H&L-G&D ». Les deux éléments suivant ont été retenus :

- La vitesse des décrochements n'est pas infinie, mais limitée à $v_d \approx v_{coin}$. Le formalisme de H&L est ensuite appliqué en intégrant la notion de libre parcours moyen X [§2.2.2]
- Le terme de nucléation n'est plus issu de la théorie de la diffusion (5.3), mais donné par le raisonnement vibrationnel de G&D, soit :

$$J = \frac{\nu_D b}{l_c^2} \cdot \exp\left(-\frac{\Delta G(\tau^*)}{k_B T}\right) \quad (5.11)$$

où ν_D est la fréquence de Debye.

Les équations du modèle hybride H&L-G&D sont donc identiques à celles basées sur H&L [§2.2.2], sauf en ce qui concerne l'expression de la fréquence de nucléation des dd par unité de longueur. On notera également que J reste dépendant de l_c (5.11). En première approximation, nous avons choisi d'utiliser l'équation de l_c issue du modèle de H&L [cf eq. (5.5)]. Ce faisant, on élimine le terme ν_d au numérateur de l'équation J et la dépendance en contrainte du terme pré-exponentiel (qui donne le comportement limite athermique) devient linéaire. Ceci a évidemment des implications sur les formes limites des quantités J et X . Ainsi, en faisant abstraction de λ_s , [eq. (5.6)], dont la variation en contrainte et température est faible, on observera que dans le modèle hybride H&L-G&D donne (cas $\tau > \tau_0$) :

- J et X possèdent la même dépendance en contrainte que dans le modèle de H&L,
- la fréquence de nucléation est telle que le terme pré-exponentiel de l'équation 5.11 devient constant.

D'un point de vue purement pratique, le modèle hybride est intéressant, puisque sa forme limite donne un comportement visqueux, comme en régime athermique. Cependant, contrairement au modèle de H&L, le coefficient de friction visqueux n'apparaît pas explicitement, dans le facteur pré-exponentiel. De ce fait, même si le terme pré-exponentiel donne des valeurs satisfaisantes à température ambiante [§III-2.4.1], il n'est pas certain que cette condition soit vérifiée à toutes les températures. Pour ce faire, il faut introduire un facteur de correction (α_{corr}) dans [eq. (5.2)] qui devient alors, pour le modèle hybride :

$$v_{vis} = \alpha_{corr} h X J \quad (5.12)$$

Le facteur α_{corr} permet d'ajuster le coefficient visqueux associé à la forme athermique du modèle, avec $\alpha_{corr} \sim 1$ à température ambiante. Finalement, on notera que ce modèle est plus simple et rapide à calculer que celui de H&L, puisque J ne fait intervenir qu'une seule variable qui dépend linéairement de la contrainte. Les autres termes peuvent être pré-calculés pour tous les segments, au début de chaque simulation.

2.3.2 Comparaison avec les autres modèles.

Le seul changement introduit dans le modèle hybride H&L-G&D intervient au niveau de la valeur du terme pré-exponentiel. Il ne devrait donc pas y avoir de grands écarts par rapport au modèle H&L du paragraphe précédent. La Fig. V-5 montre la différence par rapport au modèle de Chaussidon (CH), et la Fig. V-6 la différence par rapport au modèle de Hirth et Lothe (H&L).

Par rapport au modèle de Chaussidon [Fig. V-5] on constate les mêmes différences déjà notées avec celui basé sur H&L [§2.2.4], dont notamment le passage continu entre un régime à faible contrainte où v_{vis} est proportionnelle à L et un régime à forte contrainte, où elle en devient indépendante. Dans ce cas nous avons ajusté α_{corr} pour obtenir $v_{vis} = v_{coin}$ dans le régime athermique, soit une valeur $\alpha_{corr} \approx 0.5$ pour $B_{coin} = 34 \cdot 10^{-5}$ Pa.s.

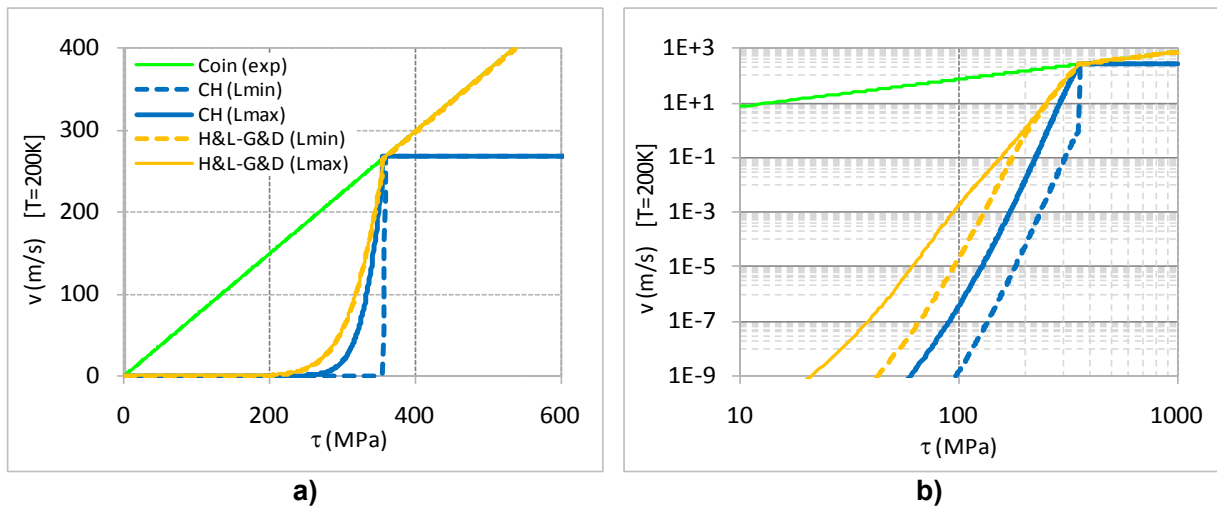


Fig. V-5 : Comparaison de la mobilité des dislocations vis dans le fer CC selon le nouveau modèle hybride H&L-G&D [§2.3.1] et celui de Chaussidon (CH) [§III-3.6]. Analyse à $T=200K$ pour les longueurs minimum [$L_{min}=50nm$] et maximum [$L_{max}=25\mu m$] dans la boîte de simulation : a) échelle linéaire ; b) échelle logarithmique.

Le modèle hybride est très similaire [Fig. V-6] au modèle H&L [§2.2]. Tel qu'énoncé en §2.3.1, la différence essentielle concerne le comportement propre au régime athermique. Dans ce cas on a ajusté α_{corr} pour obtenir la valeur de B_{vis} mesurée expérimentalement à 298K par Urabe et Weertman ($\alpha_{corr} \approx 0.25$)

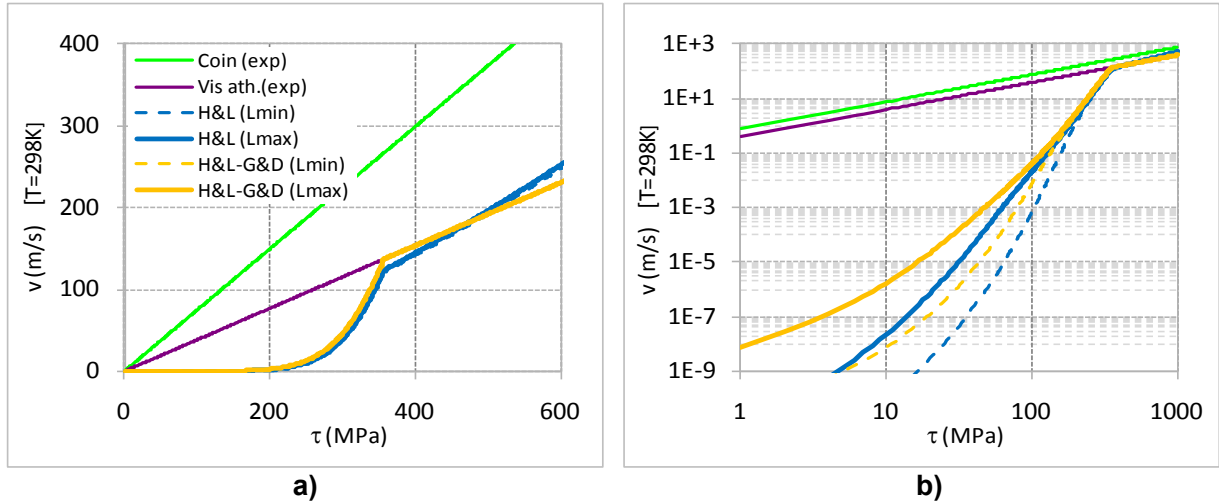


Fig. V-6 : Mobilité des dislocations vis dans le fer CC : comparaison entre le nouveau modèle hybride H&L-G&D [§2.3.1] et le modèle H&L [§2.3.1]. Les valeurs de B_{vis} et B_{coin} dans les courbes athermiques expérimentales sont issues des travaux d'Urabe et Weertman (1975) [§III-2.4.1]. Analyse à $T=298K$ pour les longueurs minimum [$L_{min}=50nm$] et maximum [$L_{max}=25\mu m$] dans la boîte de simulation : **a)** échelle linéaire ; **b)** échelle logarithmique.

On remarquera aussi que la valeur du terme pré-exponentiel à faible contrainte est plus importante dans le modèle hybride que dans le modèle H&L. L'écart de mobilité entre les parties vis et coin est donc plus faible, ce qui devrait faciliter le schéma d'intégration utilisé dans les simulations DD. Enfin, la Fig. V-6 montre que le modèle hybride ne résout pas le problème de la mobilité à basse contrainte du modèle H&L, souligné en Fig. V-4.

2.4 Discussion

Notre objectif est d'obtenir une loi de mobilité permettant d'explorer numériquement des situations très variées, y compris lorsque la contrainte interne est élevée. Les modèles utilisés jusqu'à présent en DD ne permettent pas de décrire de façon satisfaisante le comportement à forte contrainte. En effet, ils répercutent tous à forte contrainte les caractéristiques du mouvement thermiquement activé, adapté aux faibles contraintes [§2.2.4]. Nous avons alors proposé deux modèles différents pour résoudre ce problème à partir de deux idées distinctes, issues de l'analyse de Hirth et Lothe [H&L, §III-3.2.3] :

- le caractère fini de la vitesse de propagation des double-décrochements,
- la dépendance en contrainte de la longueur critique de nucléation des double-décrochements.

Dans le premier paragraphe [§2.2] nous nous sommes inspirés uniquement du modèle de H&L, dont la fréquence de nucléation de dd est évaluée à partir de la théorie de la diffusion. Ceci nous a permis de faire la transition vers le régime athermique à fortes contraintes. Ce modèle a l'avantage de n'utiliser aucun paramètre ajusté. Il reste toutefois complexe, faisant intervenir la théorie de la diffusion, et sa forme limite n'est pas la forme linéaire attendue.

Dans le deuxième paragraphe [2.3], nous avons introduit l'expression de la fréquence de nucléation issue du modèle vibrationnel de Guyot et Dorn, dans le formalisme général du modèle de H&L. Ce modèle, que nous avons baptisé « hybride H&L-G&D », offre les mêmes caractéristiques générales que le précédent. Son interprétation physique est cependant plus simple, tout en restituant une évolution linéaire aux fortes contraintes. Pour les deux propositions, nous utilisons un nouvel ajustement empirique de $\Delta G(\tau)$ sous la forme d'une loi de Kocks [Tableau V-1], dont les détails sont présentés en Annexe B.

La validité stricte de ces modèles est toutefois limitée à un certain niveau de contrainte, au-delà duquel interviennent les régimes dits « d'avalanche » ou rugueux (« rough »). Ces derniers n'ont pas encore fait l'objet d'une étude analytique permettant de les inclure dans les lois de

mobilité des dislocations utilisables par la DD. Ils commencent à être étudiés en dynamique moléculaire par plusieurs auteurs (Marian *et al.*, 2004, Chaussidon *et al.*, 2006).

Finalement, il convient de noter que même si les modèles ici présentés réussissent bien à décrire la transition vers le régime athermique à forte contrainte, ils ne reproduisent pas cette transition pour de faibles contraintes, à $T = 300\text{K}$ [Fig. V-2, Fig. V-4 et Fig. V-6]. Ce point est abordé au paragraphe suivant.

3 La limite à haute température

3.1 Introduction

L'objectif des Chapitres III et V est de proposer une loi de mobilité des dislocations vis capable de réaliser la transition du régime thermiquement activé vers le régime athermique, dans le fer CC. Avant de poursuivre cette démarche, il convient donc définir précisément ce qu'on entend par ces deux régimes, au niveau de la mobilité individuelle des dislocations.

Il est généralement admis que la mobilité des dislocations dans le régime athermique est de type visqueux [cf. eq.(5.1)], i.e. caractérisée par :

- une dépendance linéaire de la vitesse avec la contrainte à température donnée,
- un coefficient de friction B , qui varie faiblement avec la température [§III-2.4].

Cette solution est habituellement retenue (en DD) pour modéliser la cinétique des dislocations dans les matériaux à structure compacte CFC tels que le cuivre ou les alliages austénitiques de fer [§IV-1]. Dans les matériaux de structure CC tels que la ferrite, les plans de glissement des dislocations vis et coin sont, au contraire, très différents d'un point de vu atomique. Énergétiquement, cela se traduit par un potentiel à franchir très différent selon le caractère, généralement négligeable pour les dislocations coin (comme dans les CFC), mais important pour les dislocations vis, dans la plupart des conditions d'intérêt pratique.

Pour les dislocations vis dans le fer CC, la hauteur de cette barrière énergétique vaut environ 1eV au voisinage du zéro absolu. La contrainte τ_p (dite « contrainte de Peierls ») nécessaire au franchissement purement dynamique de cette barrière est estimée à 1,1GPa (calculs *ab-initio* de (Shimizu *et al.*, 2007). Pour comparaison, les dislocations coin nécessitent une contrainte de Peierls de l'ordre de 25 à 90MPa (Terentyev *et al.*, 2008a).

Dans le cas des vis, le régime de mobilité thermiquement activée est décrit par une loi d'Arrhenius [§III-3] qui se caractérise par :

- une forte dépendance en température,
- pour une température donnée, une dépendance exponentielle en contrainte.

Macroscopiquement cette différence se traduit, par exemple, par une augmentation très importante de la limite d'élasticité en traction à basse température, mais aussi par une transition fragile-ductile bien marquée [§II-5.2].

L'objet de cette étude est de relier ces deux régimes de façon continue et physiquement acceptable. Considérant le caractère énergétique de la barrière à franchir, on envisage deux sources d'énergie favorisant le franchissement : la contrainte et la température :

- à suffisamment forte contrainte (τ_p), on doit pouvoir atteindre le régime athermique quelle que soit la température. C'est surtout sur cet aspect que nous nous sommes penchés au paragraphe précédent [§2].
- à suffisamment haute température (T_{at}^{abs}), on doit également pouvoir atteindre une mobilité de type athermique, pour de faibles valeur de la contrainte.

Entre ces deux cas limites, un comportement de type visqueux devrait être obtenu pour des contraintes et températures inférieures respectivement à τ_p et T_{at}^{abs} . Par la suite, nous dénoterons ces valeurs critiques de contrainte et température, nécessaires au passage vers le régime visqueux, τ_c et T_{at} . L'évolution de ces deux grandeurs est bien évidemment étroitement liée. Ainsi, par rapport à un état de référence quelconque :

- pour un niveau de contrainte plus élevée, la température critique sera plus basse,
- pour une température plus élevée, la contrainte critique sera plus faible.

La transition vers le régime athermique est donc physiquement acceptable si la loi de mobilité reproduit l'évolution simultanée de τ_c et T_{at} . Il est donc important de revenir ici aux deux hypothèses de départ de cette étude :

- la mobilité des dislocations coin dans les régimes d'intérêt est toujours de type visqueux ou « athermique », et se caractérise par une relation linéaire en contrainte,
- dans le « régime athermique », les dislocations vis atteignent ce même comportement.

Notre définition de la « mobilité athermique » ne dépend donc pas des vitesses de déformation ni du caractère des dislocations, mais bien de la dépendance linéaire de la vitesse avec la contrainte. Pour les dislocations vis, ce régime est atteint lorsque la probabilité de franchissement de la barrière est égale à 1 (soit $\Delta G = 0$ pour des températures finies). Par ailleurs, le « régime athermique » ne se caractérise pas uniquement par la relation $v_{vis} \approx v_{coin}$, mais également par la transition de la mobilité des vis vers le régime linéaire en contrainte (i.e. de type coin ou friction visqueuse). Ainsi, Naamane (2008) utilise des niveaux de contrainte compatibles avec des essais menés à 250K, tout en imposant $v_{vis} = v_{coin}$ à cette température. Pour autant, cette description n'est pas de type « athermique », puisque la loi de mobilité reste activée thermiquement et donc, non linéaire.

Avant de commencer notre analyse, il est nécessaire d'estimer T_{at} à faible contrainte. Les observations récentes en MET in-situ de Caillard (2009) montrent des dislocations courbées pour des faibles contraintes ($\tau \approx 30\text{MPa}$ à 300K) [Fig. V-7a], très différentes des longues dislocations vis visibles à 110K, malgré une contrainte appliquée bien plus importante ($\tau > 200\text{MPa}$) [Fig. V-7a]. A 300K donc, la mobilité des dislocations vis est proche de celle des coins, pour des contraintes appliquées de quelques dizaines de MPa seulement

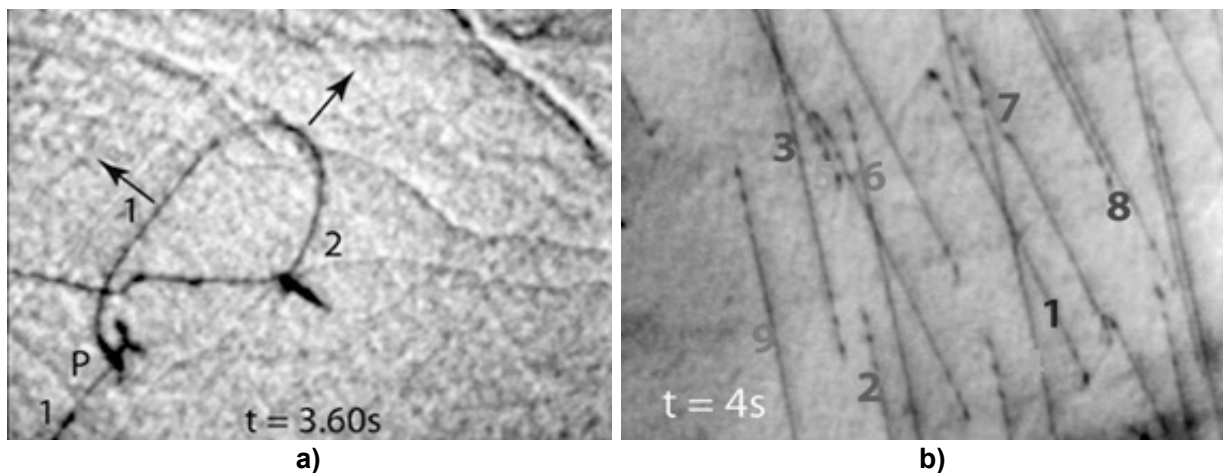


Fig. V-7 : Observations de dislocations dans du Fer pur en MET in-situ à 300K (a) et 110K (b) (Caillard, 2009)

Au paragraphe suivant, nous montrons d'abord que les lois de mobilité utilisées habituellement ne permettent pas de décrire la transition vers le régime athermique. Puis, nous proposerons une nouvelle loi dont l'énergie d'activation décroît avec la température, et nous discuterons en fin de la justification physique et de diverses implications de cette approche.

3.2 Motivation de la démarche

Dans ce paragraphe, nous utiliserons comme référence le modèle hybride H&L-G&D introduit en §2.3. Le régime visqueux associé à ce modèle est décrit à l'aide d'un coefficient de friction, dont l'ordre de grandeur est en accord avec les mesures expérimentales (Urabe and Weertman, 1975) et les simulations en dynamique moléculaire (Rong *et al.*, 2005b), soit $B \approx 10^{-5}$ Pa.s. Cette valeur permet d'estimer le comportement des dislocations vis attendu en régime athermique, soit environ 1m/s pour 1MPa (équation 5.1). En Fig. V-8 on constate qu'à ce niveau de contrainte, l'écart est de 7 ordres de grandeur entre la mobilité des coins et celle des vis, i.e. très loin des valeurs attendues, à $T = 300$ K. Ce constat avait été souligné sous diverses formes, au paragraphe précédent [§2 : Fig. V-2, Fig. V-4 et Fig. V-6].

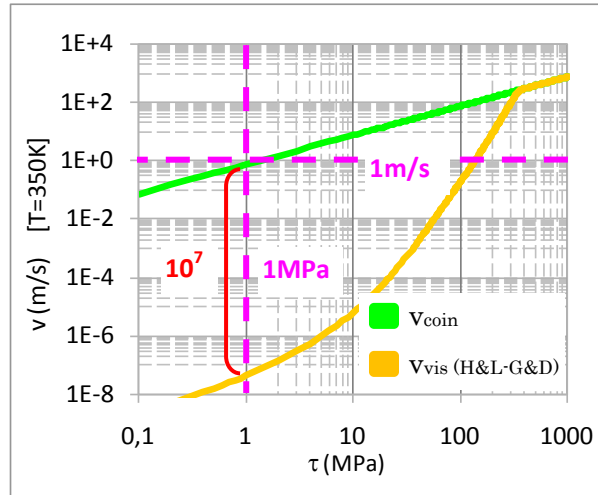


Fig. V-8 : Comparaison de la mobilité des dislocations coin et vis dans le fer CC à 350K. La vitesse des coins obéit au modèle de friction visqueuse avec $B=3,4 \cdot 10^{-4}$ Pa.s [valeur obtenue à 300K par Urabe et Weertman (1975)]. Pour les vis on utilise le modèle hybride H&L-G&D [§2.3] avec α_{corr} ajustée pour $v_{vis} = v_{coin}$ dans le régime athermique. On souligne l'écart très important entre les mobilités à faible contrainte, et tout particulièrement à 1MPa.

Il semble alors évident que les expressions considérées jusqu'à maintenant ne permettent pas de réaliser la transition vers le régime visqueux à 300K, pour des contraintes réalistes (1 m/s pour 1 MPa). Cela peut se comprendre de manière simple, si l'on remarque que :

- la « mobilité athermique » ne peut être atteinte que lorsque la probabilité de succès de passer la barrière est proche de 1, ce qui nécessite une barrière effective de l'ordre du, ou inférieure au, produit $k_B T$;
- la hauteur de la barrière (sans contrainte appliquée) est estimée à environ 1eV, i.e. très grand par rapport au produit de Boltzmann à température ambiante (0.0025eV).

De fait, telles que décrit en [§III-3.6.3], les lois thermiquement activées habituelles décrivent la dépendance en τ de l'énergie d'activation (ΔG) de sorte à assurer une vitesse des dislocations constante, pour $\tau \sim$ limite d'élasticité, dans une vaste gamme de températures. A faible contrainte (ce qui correspond à la majorité des situations, à haute température), la hauteur effective de la barrière est alors maximale afin de compenser l'accroissement avec T du produit de Boltzmann au dénominateur. Cette formulation ne permet donc, en aucun cas, de décrire la transition thermique/athermique pour des contraintes réalistes (i.e. basses, dès 1 MPa), à $T = 300$ K.

Ainsi, si l'on admet qu'au-delà de 300K la mobilité des vis est de type visqueux [Fig. V-7], les 2 améliorations suivantes sont envisageables :

- 1- Construire un nouveau modèle qui fasse évoluer l'expression de la loi de mobilité avec T et τ , afin de transformer progressivement l'exponentielle en loi linéaire.
- 2- Conserver l'expression classique de Boltzmann mais en 'modifiant' ΔG pour faire converger la loi vers le régime linéaire au moment voulu.

Dans cette étude nous choisissons la deuxième approche, bien que la justification physique soit délicate [cf §3.4], en introduisant une dépendance en température de l'énergie d'activation elle-même, *i.e.* un terme entropique. En d'autres mots :

- jusqu'ici on considérerait que la température n'avait d'influence que dans la probabilité du franchissement de la barrière.
- maintenant nous considérerons que, au même titre que la contrainte, la température a un effet direct sur la hauteur de la barrière à franchir.

Par la suite nous exposerons d'abord un premier modèle qui introduit la variation de ΔG avec la température de la manière la plus simple possible (une régression linéaire), que l'on analysera et comparera aux résultats expérimentaux et modèles précédents. Nous discuterons ensuite de la pertinence physique de ce modèle, avant de montrer les applications numériques que nous avons réalisés avec la dernière version du code : Tridis-BCC v.2.0 [§IV].

3.3 Une nouvelle loi de mobilité avec $\Delta G(\tau, T)$

3.3.1 Expression générale de la loi

Le point de départ est le modèle de doubles décrochements (dd) hybride H&L-G&D [§2.3] dans lequel nous utilisons une énergie d'activation qui dépend explicitement de la température. L'équation générale de la loi de mobilité thermiquement activée des vis s'écrit alors [cf. eq.(5.12)] :

$$v_{vis} = \alpha_{corr} h X J \quad (5.13)$$

Où :

- h : distance entre vallées de Peierls [m] ;
- $J(\tau^*, T)$: taux de nucléation de dd par unité de longueur [$\text{m}^{-1} \text{s}^{-1}$]
- $X(J, v_d)$: libre parcours moyen d'un dd [m] [eq. (5.7)]
- v_d : vitesse des décrochements $\approx$ vitesse des dislocations coin. [eq. (5.4)]

Dans ce cas, l'expression de J est presque identique à l'équation (5.11) mais, avec la nouvelle description de ΔG , elle devient :

$$J = \frac{v_D b}{l_c^2} \cdot \exp\left(-\frac{\Delta G(\tau^*, T)}{k_B T}\right) \quad (5.14)$$

où b est le module du vecteur de Burgers, v_D est la fréquence de Debye, et l_c est la largeur critique d'un double décrochement dans l'approximation de H&L [eq. (5.5)].

3.3.2 Expression de l'énergie d'activation

L'idée de base consiste à réduire la valeur de ΔG au fur et à mesure que la température augmente [§3.2]. Dans un premier temps, nous choisissons la forme la plus simple possible : une régression linéaire. Nous faisons, de plus, les hypothèses suivantes :

- l'influence de la contrainte peut encore être décrite par une loi de Kocks [§3.2.4.5],
- la hauteur de la barrière à contrainte nulle à proximité de 0K est de l'ordre de 1eV.

Nous écrivons alors l'énergie d'activation de la manière suivante :

$$\Delta G(\tau, T) = \Delta H_0 \left[1 - \left(\frac{\tau}{\tau_o} \right)^p \right]^q - A \cdot k_B T \quad (5.15)$$

où le taux de décroissance linéaire de ΔG avec la température est donné par la constante A multipliée par la constante de Boltzmann. Notons aussi que nous pourrions utiliser ici τ_p («contrainte de Peierls») comme contrainte critique τ_o dans l'équation (5.15), puisque cette contrainte annule la barrière à $T = 0K$. Il est intéressant de remarquer que dans cette expression les effets de la contrainte et de la température sur la mobilité des dislocations sont intimement liés, et l'expression (5.15) n'a de sens physique que pour $\Delta G \geq 0$. La constante A ne peut donc pas apparaître en pré-facteur de l'équation (5.14).

Par ailleurs, la température athermique absolue T_{at}^{abs} , à partir de laquelle la hauteur de la barrière est négligeable pour des contraintes qui tendent vers zéro, peut s'écrire sous la forme :

$$T_{at}^{abs} = \frac{\Delta H_0}{A \cdot k_B} \quad (5.16)$$

En pratique, il est nécessaire d'ajuster les paramètres de l'expression de Kocks dans (5.15), ce qui sera bien évidemment dépendant de la valeur de la constante A .

3.3.3 L'ajustement des paramètres

Pour l'ajustement des paramètres de l'équation (5.15), nous nous inspirons de la démarche suivie pour ajuster $\Delta G(\tau^*)$ en [§III-3.2.4.5]. Dans ce cas, il nous faut cependant choisir *à priori* une valeur de A qui permette d'obtenir T_{at}^{abs} de l'ordre de 300K pour $\Delta H_o \approx 1eV$, soit environ $A=25$.

Nous utilisons ensuite les valeurs de la variation de la contrainte effective en fin de stade 0 avec la température, obtenues à partir des mesures de $\tau_y(T)$ à vitesse de déformation constante par Kuramoto *et al.* (1979) sur des monocristaux de fer [Fig. V-9].

Nous faisons alors l'hypothèse que la vitesse des dislocations dépend uniquement de la vitesse de déformation imposée. Cette vitesse v' est choisie en raisonnant à partir des essais à haute température, où l'on suppose que la mobilité est déjà de type friction visqueuse. Dans ce cas, la mobilité suit la formule (5.1) qui, pour les très faibles contraintes appliquées (quelques MPa) donne des vitesses v' de l'ordre de 1m/s.

Nous ajustons alors (5.15) à partir des mesures expérimentales de $\tau_y(T)$ en identifiant :

$$v_{vis}(\tau_y, T_{exp}) \approx v' \quad (5.17)$$

Avec cette méthode, la variation du terme pré-exponentiel dans la loi thermiquement activée est également prise en compte.

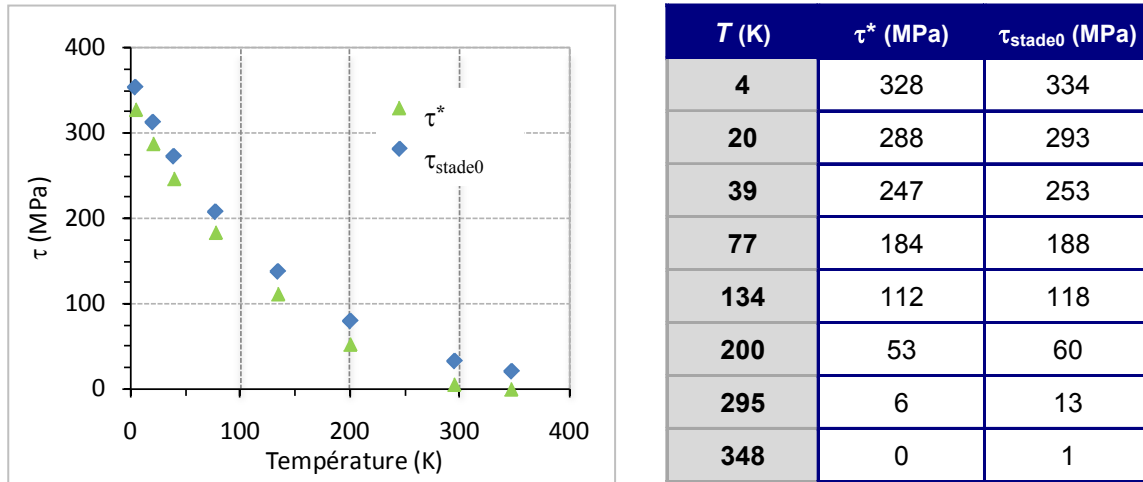


Fig. V-9 : Valeurs de $\tau^*(T)$ utilisés dans l'ajustement de l'expression (5.15), déduits à partir de ceux de $\tau_y(T)$ relevés en fin de stade 0 par Naamane (2008) à partir des mesures expérimentales de Kuramoto *et al.* (1979) sur des monocristaux de fer.

Cette procédure reste relativement simple et nécessite de fixer A et ν' à *a priori*. Neuf combinaisons de ces deux paramètres ($A = 22, 25$, et 28 pour $\nu' = 10^{-2}, 10^{-1}$, et 1 m/s) ont été testées. Les valeurs finalement obtenues sont assez peu sensibles à la combinaison choisie. Le Tableau V-2 reprend les deux jeux de paramètres qui nous permettent d'atteindre le meilleur accord avec les mesures expérimentales (sauts de vitesse de déformation et sauts de température) [§3.3.4.2], et les compare avec ceux obtenus pour $\Delta G(\tau^*)$ dans l'Annexe B [Tableau IV-1]. Dans les deux cas, la température athermique absolue est proche de 400 K , ce qui reste raisonnablement proche des valeurs expérimentales.

Entrées			Paramètres ajustés		
$\nu(\tau_y, T)$ (m/s)	A	ΔH_o (eV)	τ_o (MPa)	p	q
0,1	28	0,95	354	0,83	1,42
0,01	22	0,87	375	0,93	1,72
Kocks normal		0,76	360	0,59	1,22

Tableau V-2 : Comparaison entre les deux meilleurs jeux de paramètres de (5.15) ajustés à partir des mesures de $\tau_y(T)$ sur des monocristaux de fer par Kuramoto *et al.* (1979) [Fig. V-9], et ceux obtenus pour la loi de Kocks [Tableau V-1].

3.3.4 Comparaison avec le modèle de Kocks

3.3.4.1 Comparaison analytique

Dans le nouveau modèle, tout se passe comme si la hauteur de la barrière à franchir, et donc la contrainte nécessaire pour le faire (τ_c), diminuait avec la température. À partir de (5.15) et en prenant en compte l'expression de T_{at}^{abs} (5.16), nous distinguons trois cas de transition vers le régime athermique ($\Delta G \rightarrow 0$) :

- Lorsque $T \rightarrow 0$: le régime visqueux est atteint à $\tau_o \equiv \tau_p$ (« contrainte de Peierls »).
- Lorsque $T \geq T_{at}^{abs}$: le régime visqueux est atteint quelle que soit la contrainte.
- Lorsque $0 < T < T_{at}^{abs}$: le régime visqueux est atteint pour une contrainte $\tau_c(T) < \tau_o$.

Dans le modèle de Kocks en revanche, le régime visqueux ($\Delta G \rightarrow 0$) est atteint pour $\tau \geq \tau_o$, où τ_o est indépendante de la température. La Fig. V-10 illustre la différence essentielle que ces deux modèles induisent sur la mobilité des dislocations, en ajustant α_{corr} pour obtenir $\nu_{vis} = \nu_{coin}$ en régime athermique.

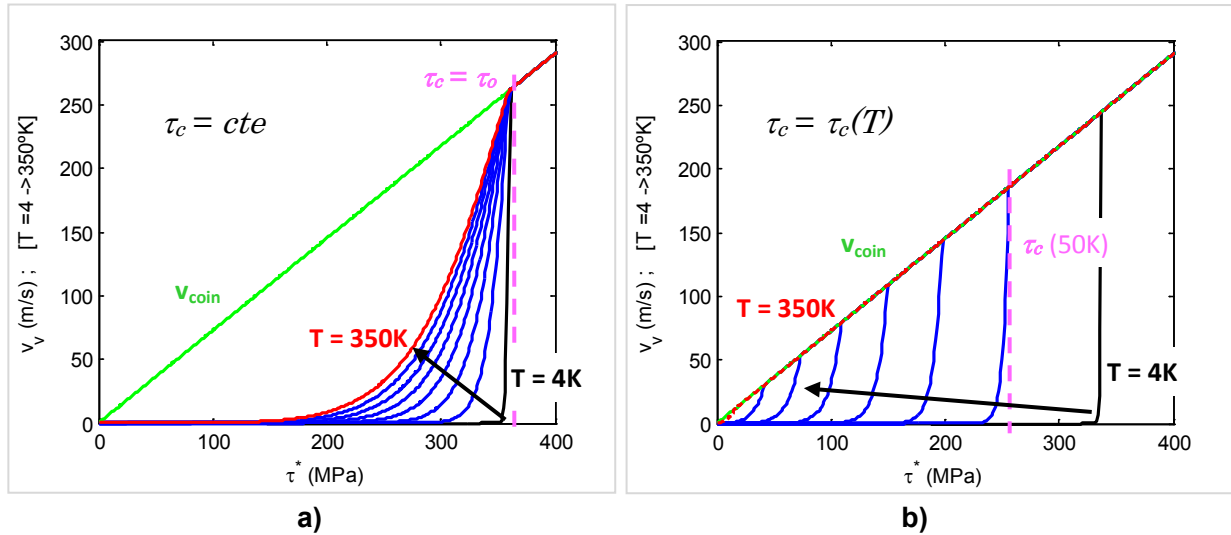


Fig. V-10 : Effet du modèle (ΔG) sur la mobilité des dislocations vis dans le fer CC [modèle hybride H&L-G&D, §2.3]: a) $\Delta G(\tau)$ selon une loi de Kocks (3.76) ; b) $\Delta G(\tau, T)$ selon l'équation (5.15).

L'analyse de la dépendance de la mobilité des vis envers la longueur de la dislocation L a été présentée en [§2.2.3, Fig. V-2b], pour différentes contraintes et températures, pour le modèle de H&L [§2.2.2]. Dans ce cas, la vitesse des dislocations vis dépendait de L pour des valeurs de contrainte non négligeable ($\tau \approx 0,4 \tau_0$) et ce, même à 350K.

Dans la Fig. V-11 nous reprenons cette analyse pour le modèle hybride H&L-G&D, en comparant l'effet de la modification de ΔG proposée en [équ. (5.15)]. Sur ces graphiques, comme en Fig. V-2b, nous comparons la mobilité de deux dislocations vis dont la longueur diffère d'un ordre de grandeur. La dépendance linéaire (en L) est ici encore signalée par la valeur 0,1 et l'indépendance totale, par la valeur unité. Nous constatons alors comment, contrairement au modèle concurrent, le nouveau modèle avec $\Delta G(\tau, T)$ assure la transition vers le régime visqueux, à 350K.

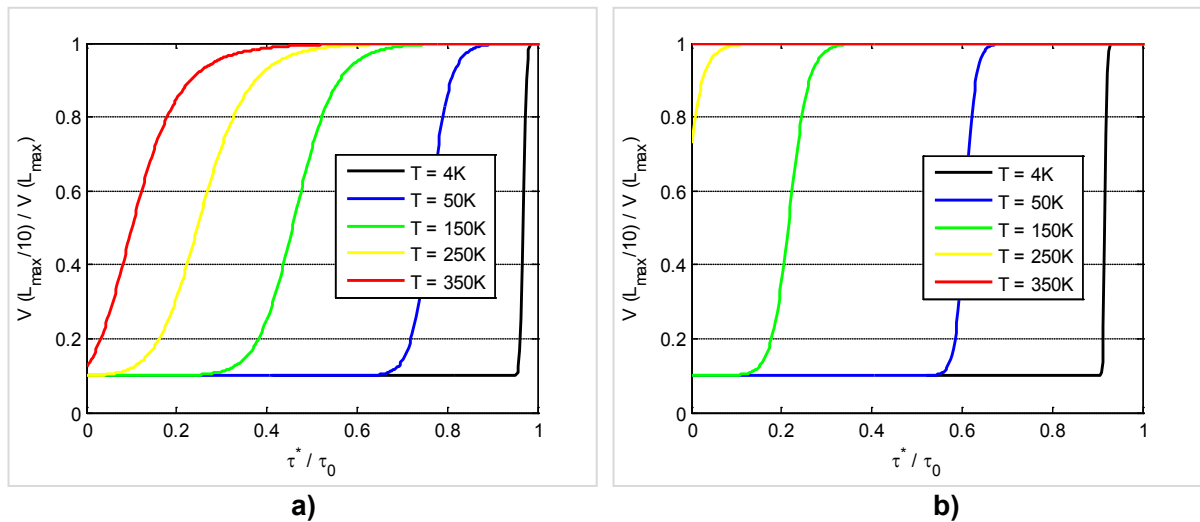


Fig. V-11 : Effet du modèle (ΔG) sur la dépendance en la longueur de la dislocation (L) de la mobilité des vis dans le modèle hybride H&L-G&D [§2.3]. Évolution en contrainte et température du ratio des vitesses entre deux dislocations dont la longueur diffère d'un ordre de grandeur ($L_{max} \approx 25\mu\text{m}$) avec ΔG : a) selon une loi de Kocks (3.76) b) selon l'équation (5.15).

3.3.4.2 Comparaison avec l'expérience

Mesures de v (τ , 298K)

Au paragraphe précédent, il a été montré que le modèle basé sur H&L [§2.2] (et par similitude celui hybride H&L-G&D [§2.3, Fig. V-6]) permettait de réaliser une transition continue vers le régime athermique à forte contrainte [Fig. V-4]. Les vitesses à faible contrainte (et à $T=300K$ en Fig. V-4) étaient également très inférieures aux mesures de Urabe et Weertman (1975).

En Fig. V-12a nous comparons à nouveau les deux modèles ΔG considérés. Avec le modèle de H&L, la mobilité à forte contrainte (régime visqueux) dépend de B_{vis} mesurée expérimentalement par Urabe et Weertman [cf. §2.2.5]. Avec le modèle hybride de H&L-G&D, nous avons ajusté α_{corr} pour obtenir le même B_{vis} , dans le régime athermique.

Dans les deux cas, on observe comment l'ajout d'une dépendance en température de l'énergie d'activation (5.15) permet de reproduire les mesures expérimentales de manière satisfaisante.

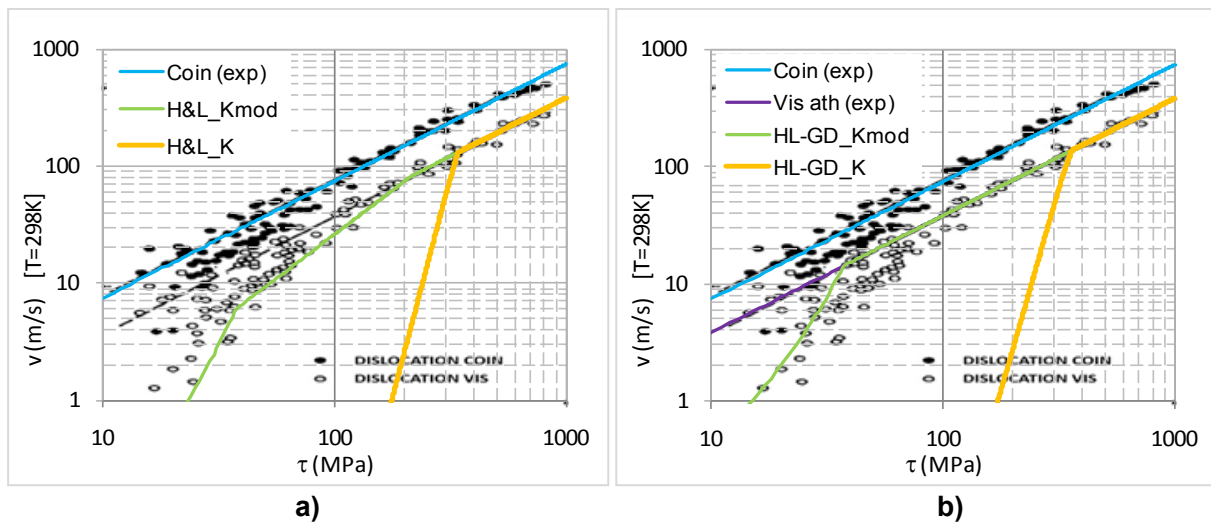


Fig. V-12 : Effet du modèle (ΔG) sur la mobilité des dislocations vis dans le fer CC à 298K : comparaison avec les mesures expérimentales d'Urabe et Weertman (1975) et les prédictions des modèles introduits au paragraphe §2 : a) H&L [§2.2]; b) hybride H&L-G&D (noté « HL-GD ») [§2.3]. L'utilisation de $\Delta G(\tau)$ selon la loi de Kocks (3.76) est dénotée par « K », tandis que l'utilisation de l'expression de $\Delta G(\tau, T)$ (5.15) est dénotée par « Kmod ».

Mesures de $\Delta\tau_r(\tau)$ lors des sauts de vitesse et déformation

Dans ce paragraphe, nous analysons l'effet des sauts de vitesse de déformation (en traction) sur nos lois de mobilité. Les valeurs présentées sont obtenues à partir du modèle hybride H&L-G&D avec et sans dépendance en température de l'énergie d'activation (ΔG). Pour l'expression (5.15) de ΔG nous avons utilisé l'ajustement du Tableau V-2 avec $A=22$ et $v'=0,01m/s$. Pour la loi de Kocks [eq. (3.76)] nous utilisons toujours l'ajustement rapporté dans l'Annexe B [Tableau V-1].

Par ailleurs, nous avons choisi pour cette comparaison deux études réalisés sur du fer CC :

- Celui de Arsenault (1964), comprenant des sauts de vitesse de déformation allant d'une valeur initiale de $10^{-6} s^{-1}$ jusqu'à 5000 fois cette valeur.
- Celui de Keh et Nakada (1968), comprenant des sauts de vitesse de déformation entre $5 \cdot 10^{-4} s^{-1}$ et $2,5 \cdot 10^{-3} s^{-1}$ à différentes températures.

Dans les deux cas, la méthode pour relever les points de comparaison à partir des modèles théoriques est la même :

- Nous obtenons une vitesse des dislocations de référence pour la vitesse de déformation de base, à partir de la contrainte effective donnée par l'équation (3.80). Cette vitesse, ne provient donc pas de la loi d'Orowan et du raisonnement macroscopique habituel. Cette valeur est adaptée à chaque formulation, pour chaque valeur de contrainte appliquée.
- Nous supposons que la densité des dislocations mobiles reste constante durant des sauts et que le changement de vitesse de déformation imposée agit uniquement (et directement) sur la vitesse des dislocations.
- Nous mesurons l'incrément de contrainte nécessaire selon chaque loi pour augmenter la vitesse des dislocations d'un facteur égal à celui imposé macroscopiquement.

La Fig. V-13 compare nos deux modèles avec les mesures de Keh et Nakada (1968). En ce qui concerne la valeur des sauts proprement dits, le modèle avec $\Delta G(\tau, T)$ décrit un peu mieux les mesures expérimentales, mais les deux produisent des résultats raisonnables. La grande différence entre les deux est l'ordre de grandeur des vitesses prédites pour le niveau de contrainte de chaque essai : celles-ci oscillent entre 10^{-9} et 10^{-7} m/s avec le modèle de Kocks, contre 10^{-3} et 10^{-1} m/s dans le nouveau modèle en $\Delta G(\tau, T)$.

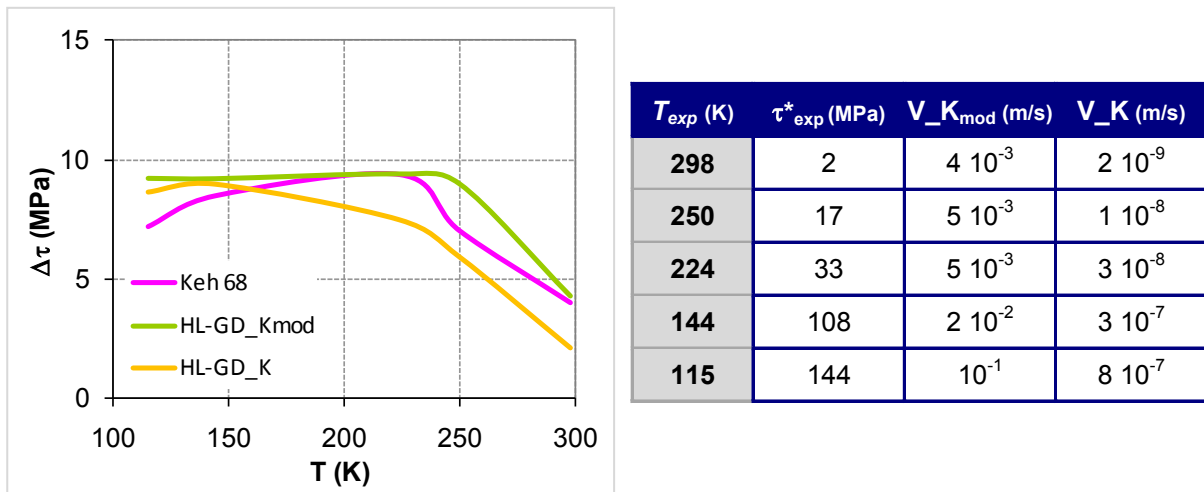


Fig. V-13 : Effet du modèle (ΔG) sur la mobilité des dislocations vis dans le fer CC : comparaison avec les sauts de vitesse et température réalisés par Keh et Nakada (1968). Le tableau rapporte les vitesses prédites par chacun des modèles, par rapport au niveau de contrainte imposée de base.

Par ailleurs, les tableaux en Fig. V-14 montrent les résultats de la comparaison avec les mesures de Arsenault (1964). Encore une fois, les valeurs des sauts fournis par les deux modèles nous semblent raisonnables compte tenu des incertitudes expérimentales et des hypothèses retenues. Comme dans la Fig. V-13, la différence la plus marquante entre les modèles est la vitesse des dislocations, par rapport aux contraintes relevées à une vitesse de déformation donnée. Notons ici que la valeur extrême de $3 \cdot 10^{-11}$ m/s atteinte à haute température avec le modèle de Kocks est directement liée à la faible contrainte effective utilisée (seulement 0,1 MPa), et serait déjà de 1 nm/s pour 1 MPa.

$\dot{\epsilon}$	T_{exp} (K)	$\Delta\tau^*_{exp}$ (MPa)	$\Delta\tau^*K_{mod}$ (MPa)	$\Delta\tau^*K$ (MPa)
5 $\dot{\epsilon}_1$	300	2	0	0
	193	9	9	8
	151	12	11	9
50 $\dot{\epsilon}_1$	300	6	3	1
	193	23	24	21
	151	25	30	24
5000 $\dot{\epsilon}_1$	300	15	30	10
	193	69	60	52

T_{exp} (K)	τ^*_{exp} (MPa)	$V_{K_{mod}}$ (m/s)	V_K (m/s)
300	0,1	$2 \cdot 10^{-4}$	$3 \cdot 10^{-11}$
193	54	$4 \cdot 10^{-3}$	$4 \cdot 10^{-8}$
151	107	$7 \cdot 10^{-2}$	$1 \cdot 10^{-6}$

Fig. V-14 : Effet du modèle (ΔG) sur la mobilité des dislocations vis dans le fer CC : comparaison avec les sauts de vitesse et de température réalisées par Arsenault (1964). Le tableau de droite rapporte les vitesses prédites par chacun des modèles, par rapport au niveau de contrainte imposée de base.

En conclusion, les deux lois permettent de reproduire l'augmentation de la contrainte observée expérimentalement lors des essais de sauts de vitesse de déformation. Dans la pratique, cet accord reste toujours ajustable dès lors que l'on se place dans la partie thermiquement activée d'une loi de mobilité dont l'énergie d'activation décroît avec la contrainte. Sur ce point, la grande différence entre les deux modèles tient dans l'ordre de grandeur des vitesses prédites, compatible avec les prédictions du modèle macroscopique d'Orowan ($v \approx \mu\text{m/s}$) dans le cas de la loi de Kocks ; compatible avec les vitesses à faible contrainte dans le domaine athermique ($v = \text{m/s}$) pour le modèle $\Delta G(\tau, T)$.

3.4 Discussion

3.4.1 Introduction

Contrairement au modèle de Kocks (3.76), l'énergie d'activation donnée par l'équation (5.15) permet une transition thermique/athermique, pour des contraintes appliquées raisonnablement basses [§3.3.4.2]. Cette caractéristique permet tout à la fois d'obtenir une évolution continue de la mobilité des vis entre basse et haute température [Fig. V-10] et de traiter correctement la dépendance en longueur L [Fig. V-11]. Cette loi permet aussi de reproduire les mesures expérimentales d'Urabe et Weertman à 298K [Fig. V-12] et la variation de la contrainte d'écoulement avec la température [Fig. V-18], tout en conservant les propriétés mesurées lors des sauts de vitesse de déformation à basse température [Fig. V-13, Fig. V-14 et Fig. V-20].

La caractéristique la plus originale de ce nouveau modèle est que la hauteur de la barrière énergétique à franchir pour entrer en régime visqueux diminue, à température croissante. La transition se fait donc non plus à contrainte fixe τ_o (comme dans la loi de Kocks), mais pour une contrainte critique $\tau_c(T)$ qui évolue entre τ_o et 0, pour T variant entre 0 et T_{at}^{abs} [§3.3.4.1, Fig. V-10]. La question que nous nous posons maintenant est l'interprétation physique de cette modification.

3.4.2 De la nature physique de la nouvelle loi

Revenons ici sur la formulation de l'énergie d'activation à partir de la variation de l'énergie libre de Gibbs en fonction des variations d'enthalpie et d'entropie du processus [§III-3.2.4.5] :

$$\Delta G = \Delta H - T\Delta S \quad (5.18)$$

Ainsi, la formulation de ΔG décrite en eq. (5.15) peut s'interpréter en introduisant un terme entropique. La forme ici énoncée n'est bien évidemment qu'une première approximation, avec une valeur constante de ΔS ($\approx 25k_B$), mais la conclusion serait la même pour toute autre variation de ΔG avec la température capable de réaliser la transition thermique/athermique.

Nous avons vu dans §III-3.2.4.5 que la contribution de l'entropie est toujours négligée, à partir de l'analyse de Schoeck [eq. (3.69), Fig. III-21]. Pour parvenir à ce résultat, Schoeck fait l'hypothèse que la dépendance en température de l'entropie (la variation de ΔG induite par le « misfit » local des atomes au col (Δg)) est proportionnelle à celle du module de cisaillement. Or, Kocks *et al.* (1975a) précisent que le rapprochement entre la dépendance en température de la force de l'obstacle (étroitement liée au terme entropique) et celle du module de cisaillement, « ignore » des phénomènes tels que « les changements de la fréquence de vibration au cœur des dislocations, les crans, et les double-décrochements ».

Dans le cas du mécanisme de doubles décrochements (dd), on pourrait considérer des sources additionnelles d'entropie, liées par exemple à la variation de la distance entre « obstacles » (l_o) ou à la possibilité de franchir l'obstacle par nucléation d'un ou plusieurs dd à n'importe quel endroit de la ligne, dans un modèle vibrationnel donné. De fait, même pour le cas d'obstacles discrets, Granato *et al.* (1964), dérivent un terme entropique additionnel, associé aux vibrations du segment de dislocation entre obstacles. Ce nouveau terme, noté ΔS_{dis} serait précédé d'un pré-facteur qui dépend de la fréquence de l'état de base (Kocks *et al.*, 1975d), dont la forme est identique à celui proposé par Guyot et Dorn (1967) pour le mécanisme de dd. Kocks *et al.* (1975d) mésestiment cette approche qu'ils jugent confuse, notamment du fait qu'ils espèrent obtenir un pré-facteur constant et indépendant de la distance entre obstacles. Or, cette dernière condition n'est certainement pas vérifiée sur la plage complète des variations en τ - T considérées dans les modèles théoriques présentés plus haut, pour lequel le facteur de fréquence varie d'environ 3 ordres de grandeur.

Il semble donc que, dans le cadre du mécanisme de franchissement des vallées de Peierls par nucléation et propagation de doubles décrochements le long d'une dislocation vis, il n'y a pas d'argument théorique solide pour négliger le terme d'activation entropique.

Le problème est qu'il n'existe aucun moyen direct de mesurer ΔS à partir des essais classiques sans effectuer des hypothèses *a priori* telles que l'origine purement élastique formulée par Schoeck (1965), qui la rendent justement négligeable.

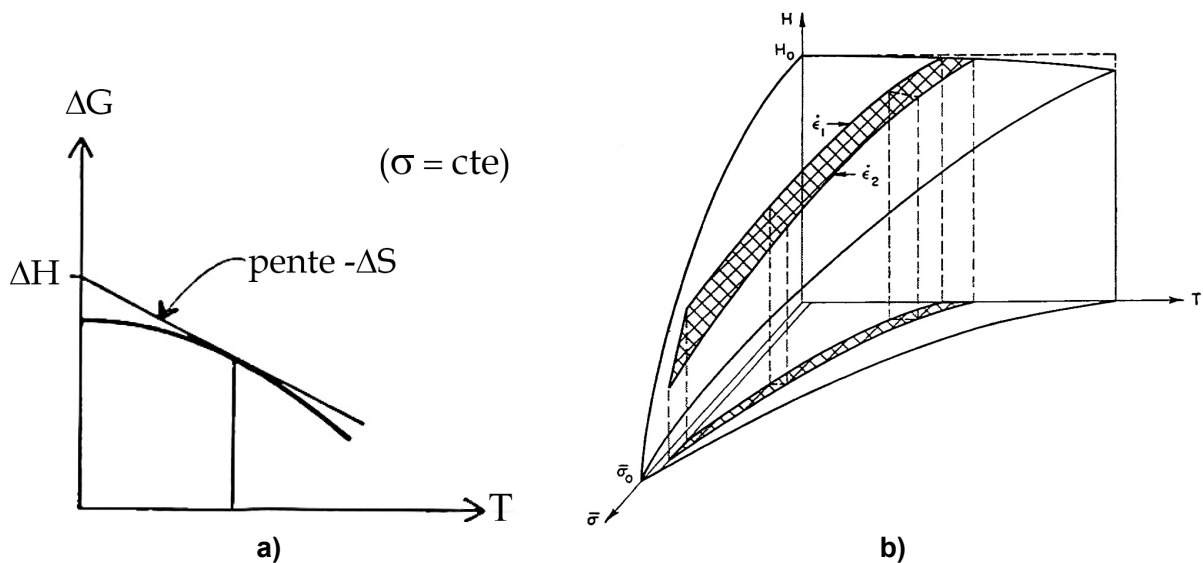


Fig. V-15 : a) Détermination expérimentale de l'entropie d'activation ΔS , nécessitant mesure de la variation de ΔG avec la température à contrainte constante [(Kocks *et al.*, 1975a), Fig. 41-4b] : b) Représentation schématique du domaine habituellement explorée lors des essais utilisés pour mesurer les paramètres d'activation (Conrad and Wiedersich, 1960)

La détermination expérimentale de ΔS nécessiterait l'évaluation de la variation de ΔG avec la température à contrainte constante [cf. eq.(3.68), Fig. V-15a], ce qui n'est pas réalisable en pratique. Les essais habituellement utilisés pour mesurer les paramètres d'activation ne couvrent que deux vitesses de déformation proches, et présentent des fortes variations de la contrainte en fonction de la température. Ce point fut particulièrement noté par Conrad et Wiedersich (1960), qui conclurent qu'étant données les limitations liées au domaine τ - T explorable expérimentalement [Fig. V-15b], il est même difficile de séparer la dépendance de ΔH avec la contrainte et/ou la température. Une difficulté similaire est soulignée par Kocks *et al.* (1975g) lorsqu'ils considèrent le franchissement d'obstacles dont le profil dépend de la température.

Ce que nous suggérons ici, c'est qu'il est envisageable d'ajuster des paramètres d'activation en négligeant l'entropie pour obtenir le comportement désirée dans le rang de τ - T exploré lors des essais (de traction), mais que ce n'est sûrement pas le cas si l'on considère le domaine de transition dans sa totalité.

3.4.3 Implications de la considération d'un terme entropique

3.4.3.1 Analyse générale

Nous tenterons ici de traduire de manière simple les implications de la contribution entropique, sur le modèle proposé.

D'un point de vue général, on peut interpréter l'influence d'un terme entropique ($-\Delta S.T$) comme une dépendance en température de « la force de l'obstacle » (Kocks *et al.* (1975h)), i.e. la hauteur de la barrière énergétique à contrainte nulle [$\Delta G_{\tau=0}(T)$], et la contrainte qui lui est associée [$\tau_c(T)$]. La Fig. V-16 illustre la signification de ces deux grandeurs, par rapport à la hauteur de la barrière et la contrainte critique de franchissement à température nulle, soit respectivement ΔH_0 et τ_0 . Sur ce schéma, $\Delta G_{\tau=0}(T)$ diminue avec la température et peut donc s'écrire sous la forme :

$$\Delta G_{\tau=0}(T) = \Delta H_0 - T\Delta S \quad (5.19)$$

Dans l'équation (5.15), ΔS est supposé constant dans le domaine τ - T considéré, ce qui n'est qu'une première approximation, servant à démontrer la pertinence de la démarche proposée. En général, le terme entropique est une fonction $\Delta S(\tau, T)$ et des travaux complémentaires seraient nécessaires, afin d'établir cette dépendance de manière plus réaliste.

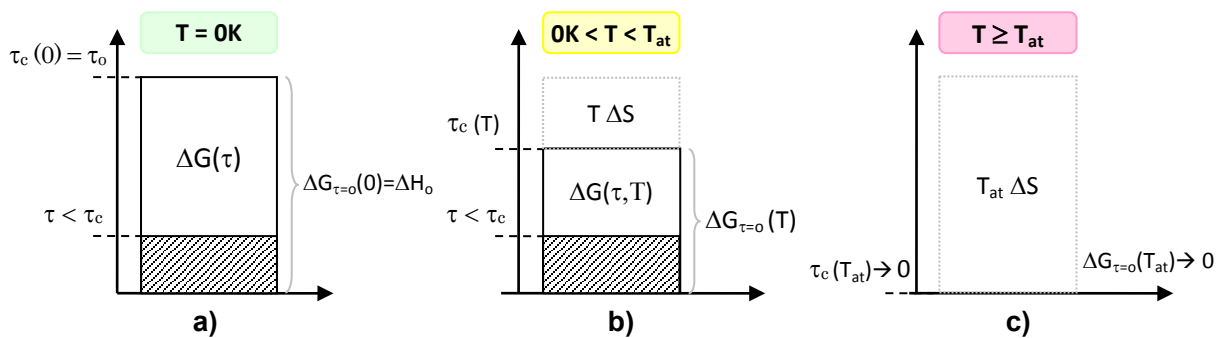


Fig. V-16 : Schéma de principe : activation thermique et contribution entropique. Le cas à 0K (a) correspond au traitement traditionnel, où la contribution de $T\Delta S$ est nulle, la hauteur effective de la barrière est ΔH_0 et la contrainte critique pour la franchir est $\tau_c = \tau_0$. Dans une situation intermédiaire (b) le terme entropique abaisse la hauteur de la barrière à contrainte nulle, et donc la contrainte τ_c qui lui est associée. A la température athermique (c) la hauteur de la barrière est nulle pour une contrainte τ_c qui tend vers zéro.

Les termes $\Delta G_{\tau=0}$ et τ_c de l'équation (5.15) dépendent forcément de la température puisque dans tous les cas, on n'admet que des valeurs $\Delta G \geq 0$. Cette formulation, combinée à l'hypothèse $\Delta S = \text{cte}$ de l'équation (5.19), correspond à un effet de la contrainte τ tel que décrit en Fig. V-15. En s'inspirant toujours de la forme de la loi de Kocks (3.76), nous pourrions aussi envisager d'inclure une dépendance en τ fonction de la hauteur à franchir, en faisant explicitement apparaître $\tau_c(T)$ dans l'expression de $\Delta G(\tau, T)$ sous la forme :

$$\Delta G(\tau, T) = \Delta H_0 \cdot \left[1 - \left(\frac{\tau + (\tau_o - \tau_c(T))}{\tau_o} \right)^p \right]^q \quad (5.20)$$

On constate alors que, puisqu'à température nulle on a $\tau_c(T) = \tau_o$, l'équation (5.20) tend bien vers la forme traditionnelle de $\Delta G(\tau)$ pour une loi de Kocks, lorsque $T \rightarrow 0$. La Fig. V-17 schématise la différence entre les approches des équations (5.15) et (5.20), sur laquelle nous ne nous prononcerons pas davantage.

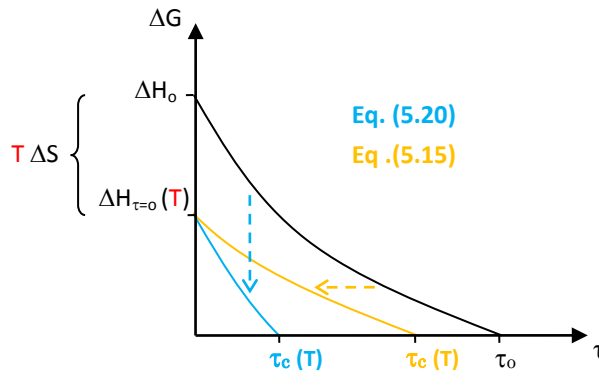


Fig. V-17 : Schéma comparatif d'évolution de l'énergie d'activation ΔG avec la contrainte et la température selon les expressions (5.15) et (5.20).

3.4.3.2 La contrainte critique τ_o dans l'ajustement de ΔG

La prise en compte d'un terme entropique dans le cadre de notre modèle a un impact sur la signification de τ_o dans l'ajustement de l'énergie d'activation. En effet, dans l'expression de Kocks (3.76) appliquée au mécanisme des doubles décrochements, la signification physique de τ_o correspond bien à la contrainte de Peierls (τ_p). Toutefois, cette interprétation se perd lorsque l'équation (3.76) est ajustée à partir des valeurs de la limite d'élasticité à une vitesse de déformation donnée. Tel que discuté en §III-3.2.4.5, la valeur de τ_o ainsi obtenue n'est pas la contrainte de Peierls, mais la limite quand $T \rightarrow 0$ de la contrainte $\tau_y(T)$ à la vitesse de déformation de l'essai. Cette valeur de τ_o est de fait très inférieure à la valeur théorique de τ_p mais en pratique, devient la contrainte de Peierls de la loi de mobilité. Ainsi, en Fig. V-10a, la mobilité des vis adopte un comportement visqueux pour τ_o quelle que soit la température, ce qui est faux pour les raisons que nous venons d'évoquer.

Maintenant, en considérant le terme entropique tel que décrit plus haut, la valeur τ_o de l'ajustement n'est plus la limite quand $T \rightarrow 0$ de $\tau_y(T)$, mais la contrainte critique $\tau_c(T)$. La valeur de τ_o reprend ainsi son sens physique initial. On pourra critiquer le fait que les valeurs que nous avons ajustées pour τ_o sont pourtant toujours du même ordre de grandeur. Cependant, cela tient exclusivement au choix de l'approximation $\Delta S = \text{cte}$ et au choix de l'évolution avec la température du comportement en contrainte, pour une barrière de hauteur donnée [Fig. V-17]. En effet, bien que nous n'ayons pas étudié ce point particulier, il est possible que la valeur de ΔS varie fortement en s'approchant du zéro absolu, et cela suffirait pour obtenir une valeur de τ_o (et donc de τ_p) bien plus importante. Dans ce sens, notre valeur n'est qu'une limite du comportement à haute température extrapolé vers les basses températures.

3.4.3.3 Considérations sur le mouvement saccadé à faible température.

Dans §III-3.3 nous avons vu que Caillard et Martin ont introduit la possibilité d'un nouveau mécanisme de franchissement des vallées de Peierls (le « *locking-unlocking* ») pour expliquer les différences de mobilité observées en MET in situ dans le fer pur. En effet, à faible température (110K) Caillard (2009) observe un mouvement saccadé, qu'il estime incompatible avec le mécanisme de doubles décrochements, alors qu'à haute température (300K) le mouvement est continu. Sur ce point, et à l'égard de la loi de mobilité ici décrite, nous ne pensons qu'il n'est pas nécessaire de recourir à un nouveau mécanisme pour rendre compte de ce phénomène.

En effet, avec la loi proposée, la variation de contrainte $\Delta\tau$ nécessaire pour augmenter la vitesse d'une dislocation de quelques $\mu\text{m/s}$ à quelques mm/s (ordre de grandeur mesuré par Caillard), n'est que de 20MPa environ. Par ailleurs, la cause de cette variation ne se limite pas forcément aux hétérogénéités de la contrainte interne, puisque les ancrages des dislocations peuvent également induire une augmentation de la contrainte appliquée.. Ceci est d'ailleurs vérifié dans les simulations de DD menées à vitesse de déformation imposée. Le phénomène suivant pourrait expliquer le mécanisme de *locking-unlocking* :

- Considérons comme contrainte de référence τ_{ref} celle nécessaire pour garantir la vitesse de déformation imposée si les dislocations avançaient toutes librement dans le cristal.
- Supposons une machine relativement rigide.
- Lorsqu'une dislocation s'arrête sur un point d'ancrage, la vitesse de déformation diminue, ce qui induit une augmentation de la contrainte appliquée.
- Lorsque la contrainte est suffisamment importante pour libérer la dislocation, celle-ci se retrouve libérée à une contrainte $\tau > \tau_{ref}$. Or, même si la variation de contrainte n'a pas été très importante, avec une loi de mobilité exponentielle ceci induit une vitesse de déformation très supérieure à celle imposée, ce qui conduit à une forte baisse de la contrainte appliquée, qui arrête de fait le mouvement.
- Par ailleurs, si la vitesse est suffisamment importante, il est probable qu'avant que la contrainte ait le temps de baisser suffisamment, la dislocation se soit déjà arrêtée sur un autre obstacle, recommençant le processus.

De façon similaire, Kocks *et al.* (1975b) soulignent comment pour une température donnée le glissement à une contrainte inférieure au seuil mécanique nécessaire au franchissement d'une barrière, tel que représenté par une loi d'Arrhenius, serait saccadé : c'est précisément le cas évoqué ici.

Par ailleurs, si comme nous l'avons décrit, la loi devient athermique à haute température (régime visqueux), de telles différences de mobilité ne seraient jamais possibles pour des variations locales de τ raisonnables. Ceci pourrait donc expliquer pourquoi le mouvement saccadé n'est pas observé à 300K, où les dislocations glissent de manière continue comme pour une contrainte appliquée bien au-dessus du seuil critique pour franchir la barrière (Kocks *et al.*, 1975b).

Par ailleurs, les travaux de Caillard sur un alliage 3%Si Fe montrent un mouvement saccadé même à 300K. Dans ce cas, la très forte augmentation de la limite d'élasticité par rapport à celle du fer pur pourrait être expliquée par l'introduction d'une nouvelle barrière liée à la présence du silicium. Si une telle barrière au mouvement des dislocations nécessite environ 100MPa pour déformer le matériau, on serait à nouveau dans les conditions d'un régime thermiquement activé, dont la dépendance exponentielle de la mobilité rendrait le mouvement saccadé.

3.5 Simulations en dynamique de dislocations

Pour illustrer le comportement de la loi de mobilité incluant un terme entropique, nous avons mis en place des simulations en dynamique des dislocations, caractérisées par :

- L'emploi du code Tridis BCC dans sa dernière version (§IV-2.7), en désactivant le glissement dévié.
- Un volume de simulation cubique de $25\mu\text{m}$ d'arête en conditions périodiques suivant les trois directions $\langle 001 \rangle$.
- Une microstructure initiale composée d'un ensemble de segments ancrés de nature et disposition aléatoires sur un seul système de glissement (système 5 du Tableau IV-1).
- Une sollicitation en cisaillement pur dont la cission résolue est maximale pour le système choisi.

Pour ces simulations nous ne nous intéresserons qu'au comportement de la loi de mobilité. De fait, nous n'avons pas pris en compte l'effet de la forêt ni du glissement dévié, qui n'ont pas été considérés pour l'ajustement de la loi.

Pour cette étude numérique, nous avons retenu la loi de mobilité des vis ajustée pour $v(\tau, T) = 0,01\text{m/s}$ [Tableau V-2], que nous utilisons pour étudier la dépendance de la contrainte d'écoulement plastique avec la température, et les sauts de vitesse de déformation.

3.5.1 Dépendance en température de la contrainte d'écoulement

Ces simulations sont réalisées pour une vitesse de déformation de 40s^{-1} , choix réalisé pour obtenir le niveau de contrainte souhaité au vu de la microstructure choisie. Pour atteindre des vitesses de déformation plus faibles nous aurions eu besoin d'utiliser des densités de dislocations trop faibles qui auraient nécessité des volumes de simulation trop grands. La Fig. V-18a montre les résultats que nous avons obtenus, que nous comparons aux données de $\tau_y^*(T)$ expérimentales de Kuramoto *et al.* (1979) [§3.3.3] dans la Fig. V-18b.

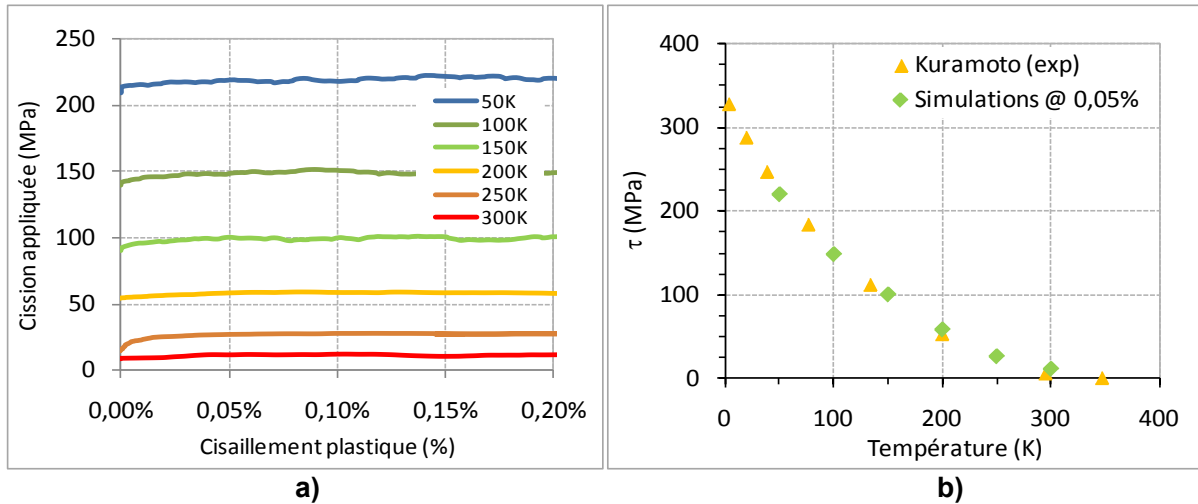


Fig. V-18 : Courbes de traction simulées avec Tridis BCC : **a)** évolution de la cission appliquée sur le système pour une vitesse de déformation de 40 s^{-1} pour des températures entre 50K et 300K ; **b)** Comparaison avec les mesures expérimentales de $\tau_y(T)$ de Kuramoto *et al.* (1979) ayant servi pour l'ajustement de la loi [§3.3.3].

Par ailleurs, notons ici que, l'hétérogénéité des mobilités vis-coin avec la température induit des différences très marquées, au niveau de l'évolution de la microstructure : à 50K les sources de caractère vis contribuent faiblement au cisaillement plastique cumulé, alors qu'elles deviennent très actives à 300K. Ainsi, alors que la densité des dislocations se situe autour de 10^{11} m^{-2} dans les simulations à 50-150K, elle augmente jusqu'à $5 \cdot 10^{11} \text{ m}^{-2}$ à 200K et 10^{12} m^{-2} à 300K. La Fig. V-19 illustre cette asymétrie pour des niveaux de contrainte comparables à ceux estimés par Caillard (2009) pour 300K et 110K.



Fig. V-19 : Microstructures de dislocations déformées en cisaillement simple à contrainte imposée : **a)** 33MPa à 300K ; **b)** 160 MPa à 110K. La configuration est similaire à celle utilisée dans l'étude de la contrainte d'écoulement mais avec un nombre réduit de sources initiales.

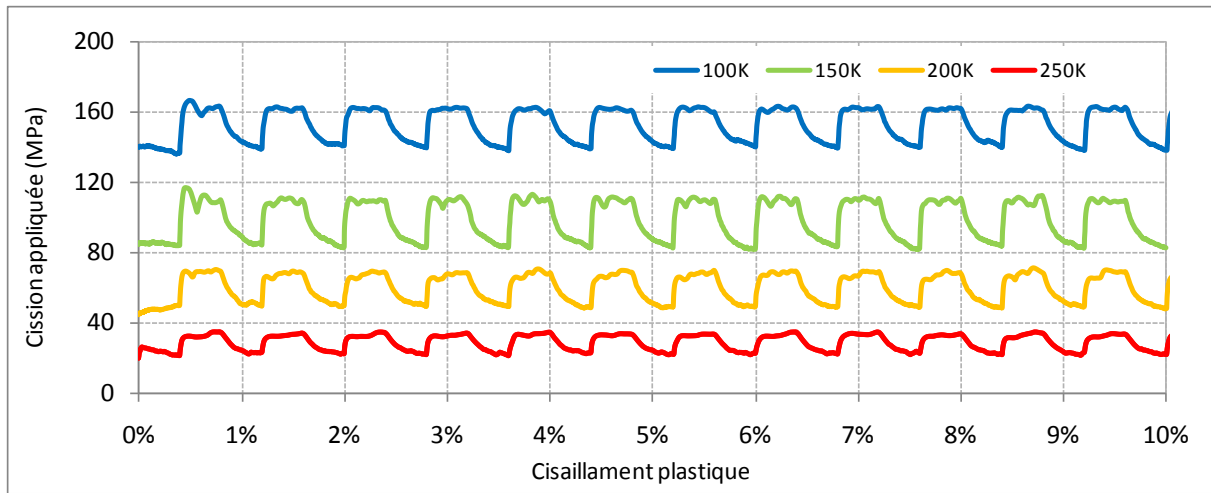
3.5.2 Sauts de vitesse de déformation

Nous analysons ici les variations de la contrainte appliquée induites par des sauts de la vitesse de déformation imposée. La microstructure initiale est la même que dans les essais de traction, la vitesse de déformation initiale est de 20 s^{-1} (contre 40 s^{-1} précédemment). Les sauts de vitesse se caractérisent par un facteur dix. Ces valeurs sont choisies pour comparer nos résultats aux mesures expérimentales de Nakada et Keh (1968), dont la vitesse de déformation initiale [$8.3 \cdot 10^{-5} \text{ s}^{-1}$] est deux fois inférieure à celle des essais de Kuramoto *et al.* (1979), utilisés pour l'ajustement de notre loi de mobilité.

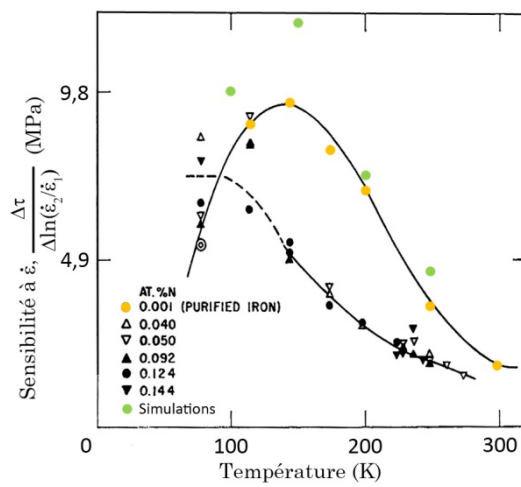
La Fig. V-20a montre les courbes de traction obtenues, tandis que sur la Fig. V-20b nous les comparons aux mesures expérimentales de Nakada et Keh. Les valeurs de $\Delta\tau$ relevées correspondent aux valeurs moyennes des différents sauts obtenus pour chaque température. Pour le calcul de la moyenne, nous ne tenons pas compte du premier saut de chaque série, dont la microstructure initiale est très différente de celle des autres sauts [Fig. V-20c].

Comme on pouvait s'y attendre du fait des valeurs relevées analytiquement [§3.3.4.2], ces résultats montrent un accord qualitativement bon avec l'expérience, avec un maximum vers 150K et une décroissance très nette de la sensibilité de la contrainte à la vitesse de déformation à plus haute ou plus basse température.

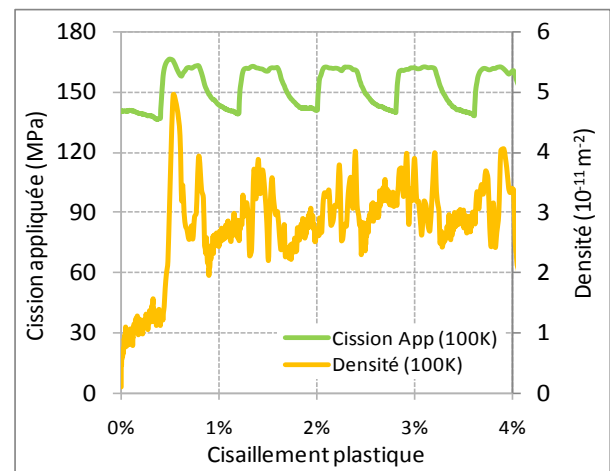
Cependant, il faut noter ici que, contrairement aux suppositions faites dans l'ajustement macroscopique des lois de vitesse, la densité de dislocations évolue sensiblement au moment des sauts effectués dans ces simulations (voir Fig. V-20c à 100K).



a)



b)



c)

Fig. V-20 : Réponses en traction à des sauts de vitesse de déformation entre 20 s^{-1} et 200 s^{-1} : **a)** courbes de traction simulées ; **b)** comparaison de la sensibilité de la contrainte à la vitesse de déformation avec les mesures expérimentales réalisées par Nakada et Keh (1968). Les valeurs des simulations sont calculées comme la moyenne des sauts en écartant les premiers de chaque série ; **c)** évolution de la densité des dislocations à 100K.

4 Simulations du comportement en flexion d'une latte de ferrite par DD

Nous avons utilisé le nouveau code dans deux cas configurations spécifiques :

- La première illustre les caractéristiques du glissement dévié dans une latte de ferrite sollicitée en flexion pure à basse (78K) et haute (293K) température. Les résultats sont comparés aux observations expérimentales de Sestak et Libovicky (1963) [§4.1]
- La deuxième montre l'évolution de la contrainte interne à basse température (50°K et 200°K) lors de la flexion d'une latte de ferrite et ses implications dans l'étude du clivage [§4.2] dans la continuité des travaux de Chaussidon

Sauf mention explicite, pour ces deux applications nous utilisons la dernière version du code Tridis-BCC v2.0 [DGR3, §IV-2.7] avec la nouvelle loi de mobilité des dislocations de vis [§3], tout en tirant parti de l'accélération du code liée à la nouvelle méthode des boîtes [§IV-3.4.3]

4.1 Illustration du sens de l'asymétrie maclage/anti-maclage

4.1.1 Introduction

Nous avons vu précédemment [§IV-2.4.1] comment Chaussidon avait introduit l'asymétrie maclage/anti-maclage dans le glissement dévié des dislocations vis à basse température. Dans ce cas, le glissement dévié n'est pas permis dans les régions d'anti-maclage, en accord avec les observations expérimentales réalisées dans de nombreux matériaux à structure CC tel que l'alliage de Nb at.5%Mo [Fig. V-21a]. Cependant, cette particularité disparaît à haute température, où l'on observe que le glissement dévié a lieu autant dans les régions de maclage que d'anti-maclage [Fig. V-21b].

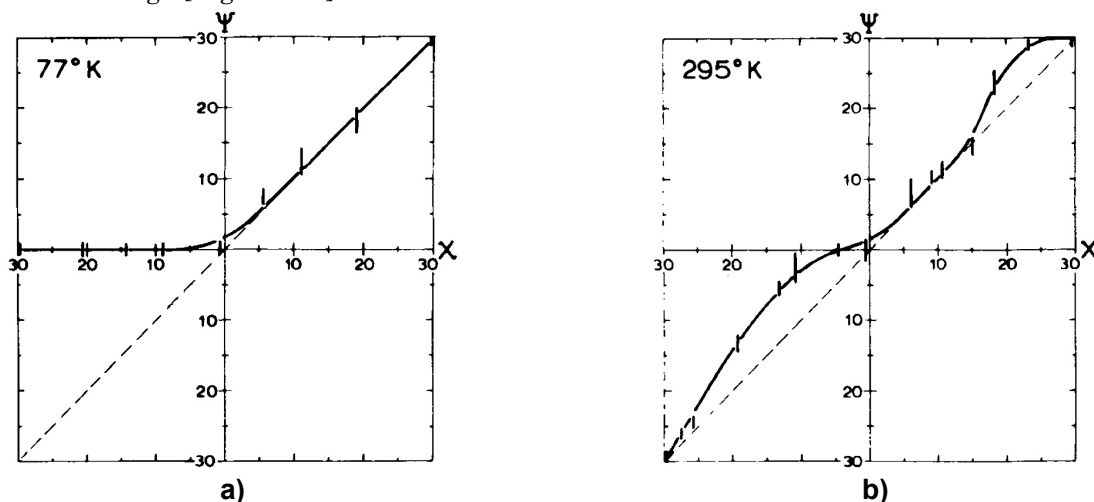


Fig. V-21 : Angle de glissement moyen ψ d'une dislocation vis en fonction de l'orientation χ du PCRM à 77K (a) et 295K (b) sur un alliage CC Nb at. 5%Mo (Christian, 1983)

A l'heure actuelle, Tridis-BCC ne permet pas de reproduire ce changement de comportement, mais il est toutefois possible de sélectionner le type de glissement dévié souhaité pour chaque simulation [§IV-2.4.1]. Dans cette partie nous illustrons cet aspect en combinaison avec le changement de la mobilité des dislocations vis à haute température.

4.1.2 Simulations et comparaison à l'expérience

Le but des simulations présentées ci-après est de comparer les prédictions (qualitatives) du code Tridis-BCC avec les observations de Sestak et Libovicky (1963) menées sur des monocristaux de Fe 3%Si, après déformation en flexion. Ces auteurs ont observé les traces de glissement des dislocations lors de la flexion des échantillons d'environ 1,5 mm d'épaisseur à 78K et 293K. Nous avons donc mis en place une simulation très similaire à celle utilisée dans

l'étude de la bainite [§2.2]. Par rapport à celle-ci, nous avons introduit les modifications suivantes :

- La taille de la latte a été multipliée par 10 : $100 \times 100 \times 20 \mu\text{m}$.
- La vitesse de courbure imposée a été divisée par 10 : $-2 \cdot 10^8 \text{ m}^{-1}\text{s}^{-1}$.
- Des dislocations d'un seul système de glissement (8 dans le Tableau IV-1) pénètrent la latte à partir du domaine virtuel, autant du côté en compression que de celui en traction [Fig. V-22].

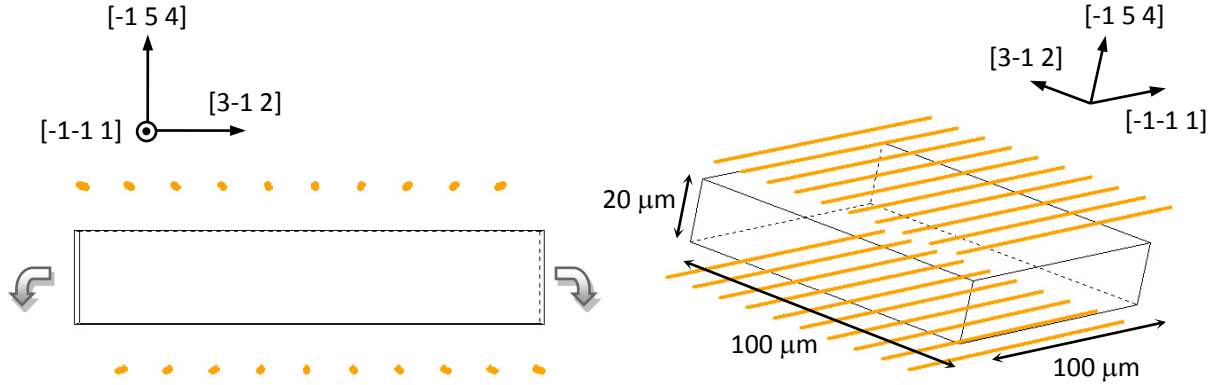


Fig. V-22 : Configuration initiale des simulations pour illustrer l'asymétrie du glissement dévié dans les régions de maclage et anti-maclage dans le fer CC (version à 77K).

4.1.2.1 Basse température (77K)

À faible température et vitesse de déformation (10^{-7} s^{-1}) [Fig. V-23a], on constate tout d'abord l'asymétrie entre les zones de maclage (compression) et anti-maclage (traction). En effet, alors que dans la zone en traction le glissement dévié n'est pas activé, et les dislocations suivent leur plan de glissement primaire, de type (110), dans les zones de maclage on retrouve bien un glissement non cristallographique qui s'opère sur deux plans de type (110). Par ailleurs, dans la zone de maclage les dislocations semblent parcourir des distances relativement élevées entre changements de plan, ce qui pourrait être une signature du mouvement saccadé induit par la loi de vitesse thermiquement activée à basse température.

Comme le montre la figure [Fig. V-23b], les microstructures simulées par Tridis-BCC ressemblent fortement aux observations expérimentales. L'image ici présentée correspond à une valeur de la composante (2,1) du tenseur de Nye de -350 m^{-1} (courbure plastique).

4.1.2.2 Haute température (293K)

À haute température (293K) et pour une vitesse de déformation de 10^{-6} s^{-1} le glissement non cristallographique est possible, tant dans les zones en traction qu'en compression [Fig. V-24a]. On observe que les traces de glissement sont courbes, témoignant d'un déplacement plus continu, typique du régime athermique. Par ailleurs, on observe aussi les effets de la contrainte interne sur la courbure des traces, qui tendent à dévier vers les régions de moins forte densité de dislocations. Cette caractéristique est accentuée à haute température, du fait de la grande mobilité des dislocations vis, qui permettent de déformer la latte avec une contrainte appliquée bien inférieure.

Ce comportement est qualitativement bien reproduit dans les simulations réalisées avec Tridis-BCC lorsque le glissement dévié est autorisé indifféremment dans tous les plans, c'est en dire lorsque les zones de maclage-antimaclage ne sont plus prises en compte. En figure Fig. V-24c, la configuration initiale est identique à celle utilisée à basse température et la courbure atteinte est de 275 m^{-1} . Dans les deux, la contrainte appliquée maximale (aux surfaces de la latte) oscille autour de $\pm 170 \text{ MPa}$, au lieu de ± 450 à 77K.

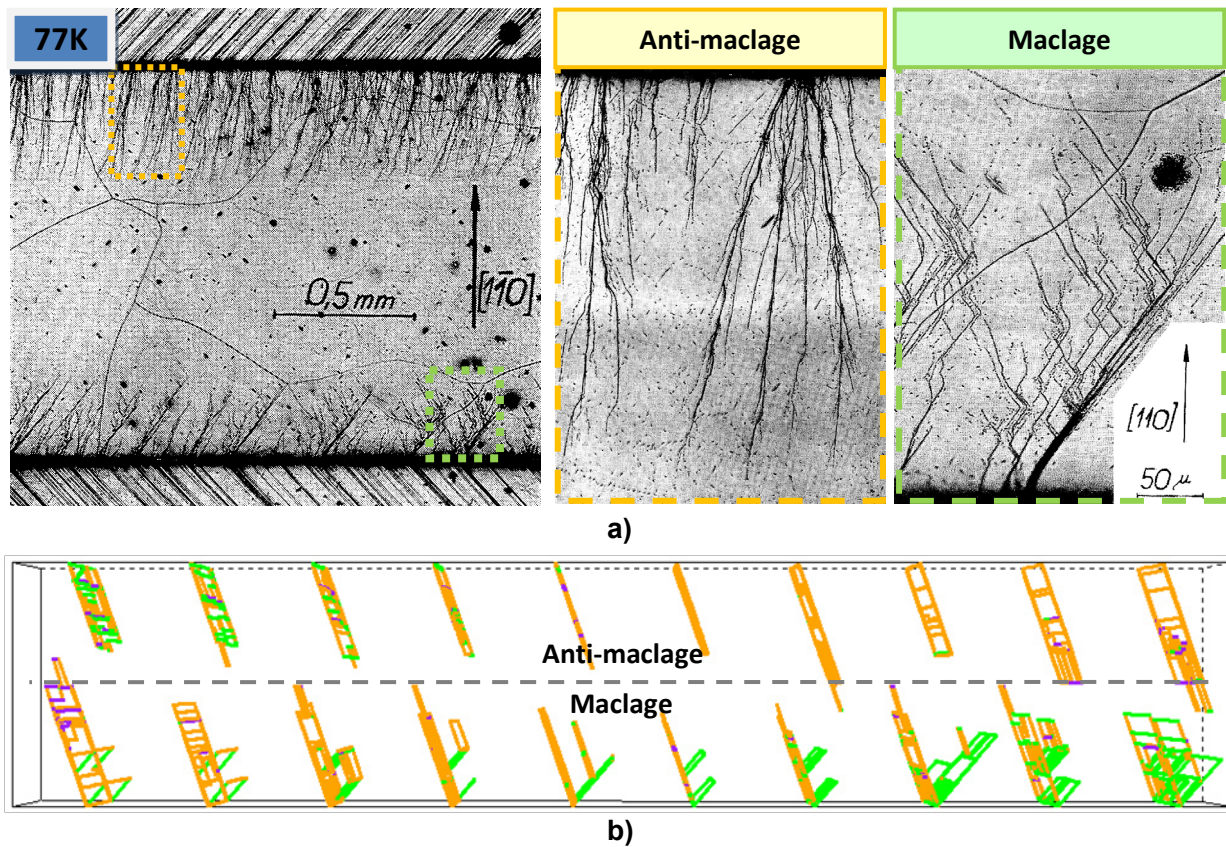


Fig. V-23 : Illustration de l'asymétrie du glissement dévié à basse température dans le fer CC : **a)** Observations expérimentales de Sestak et Libovicky (1963) ; **b)** simulation avec le code de dynamique de dislocations Tridis BCC.

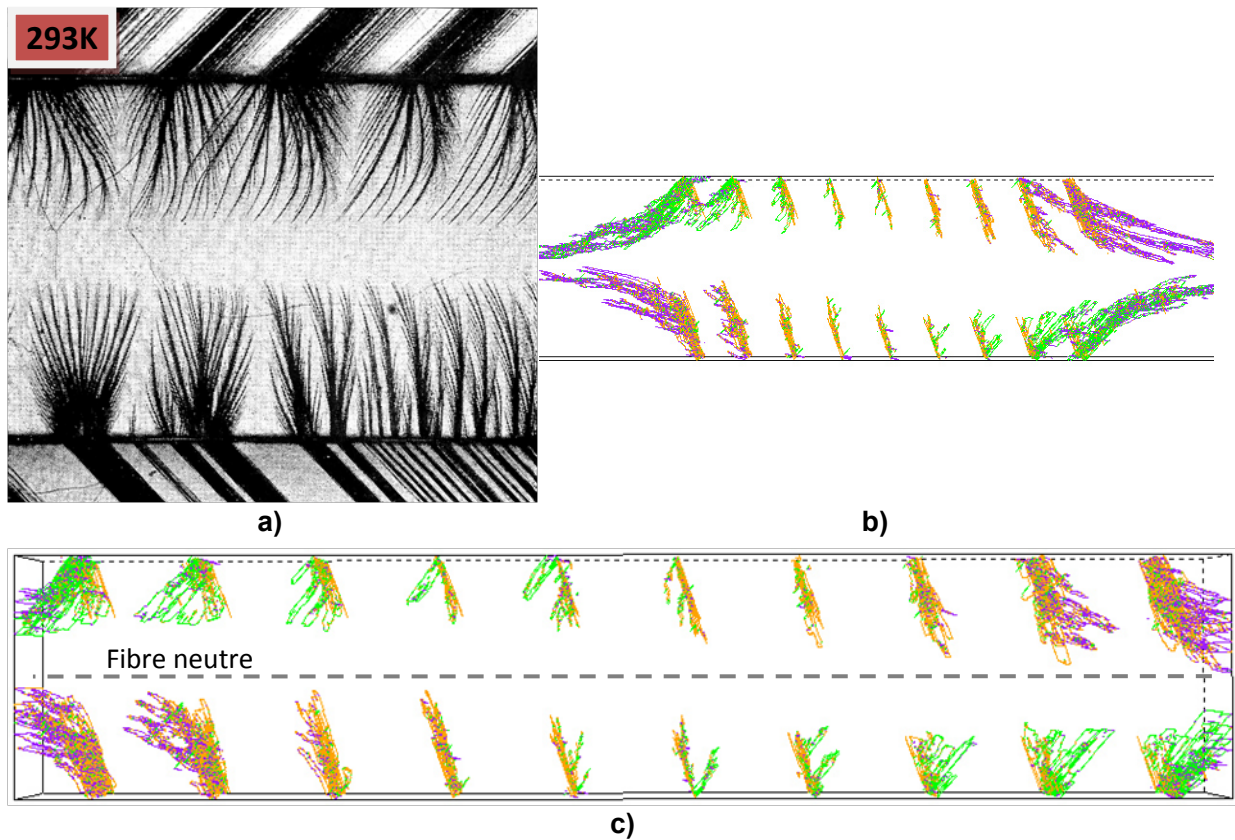


Fig. V-24 : Déformation d'une latte de fer CC en flexion à haute température (293K) : **a)** Observations expérimentales de Sestak et Libovicky (1963) ; **b)** et **c)** Simulation avec le code de dynamique de dislocations Tridis-BCC

4.2 Evolution de la contrainte interne lors de la flexion d'une latte de ferrite

4.2.1 Introduction

Une des applications du code Tridis-BCC v1.0 développé par Chaussidon a concerné l'analyse de l'évolution de la contrainte interne (latte de ferrite sollicitée en flexion), et ses implications dans l'amorçage du clivage, dans les alliages tels que l'acier de cuve REP. La simulation présentée au Chapitre IV [§IV-2.2] est identique à celles décrites dans (Chaussidon, 2007, 2010), à l'exception de la configuration initiale (qui est asymétrique, dans le cas présent). Chaussidon a montré que le développement de la microstructure au sein de la latte a des effets différents selon le plan de clivage considéré (familles de plans perpendiculaires aux directions $\langle 001 \rangle$).

- Sur les plans (010) et (001) la contrainte interne écrante la contrainte appliquée : la résultante (contrainte effective) diminue donc avec la déformation plastique cumulée.
- Sur le plan (100) la contrainte appliquée est nulle par construction, mais la résultante augmente avec la déformation au fur et à mesure que la microstructure se développe.

Par ailleurs, comme le montre la Fig. V-25, ces deux phénomènes sont plus marqués à haute température, où la microstructure des dislocations qui se développe est plus dense et plus complexe.

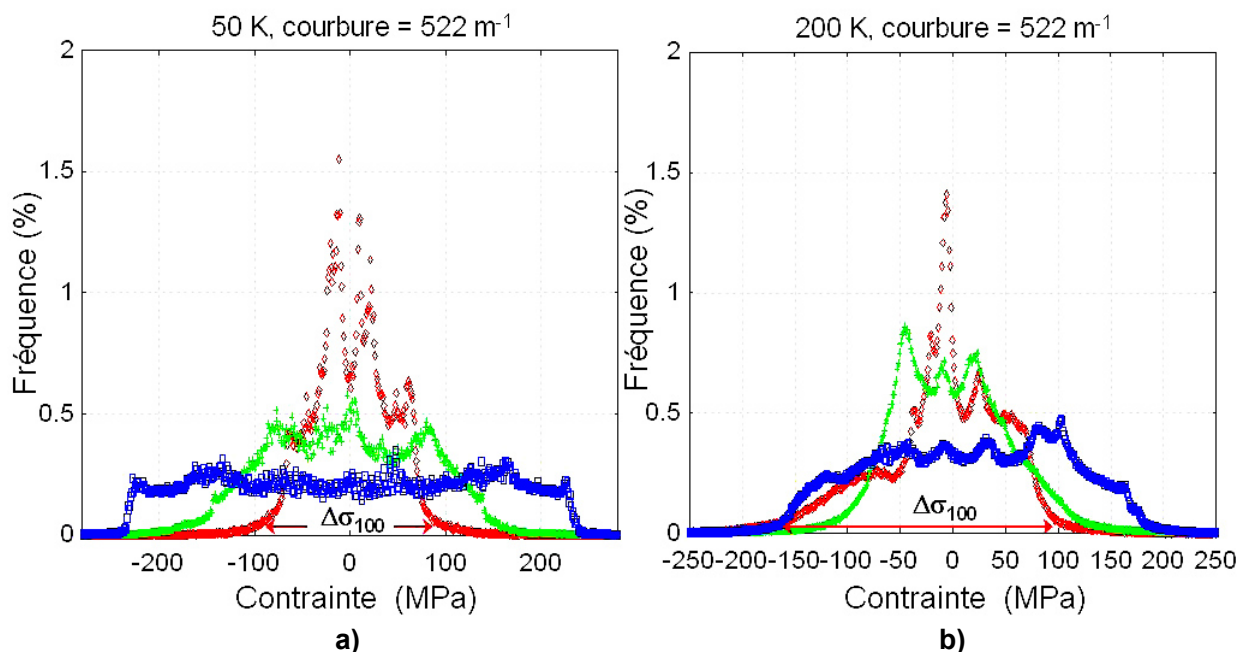


Fig. V-25 : Distribution des contraintes résolues sur les 3 plans de clivage : normale à (100) $\diamond$, normale à (010) $\bullet$, et normale à (001) $\square$, pour 50K (a) et 200K (b) (Chaussidon, 2007, 2010).

Cette première étude a été complétée par l'analyse de l'évolution de l'écrantage, avec la courbure plastique. A partir de la configuration initiale décrite dans la Fig. V-26a, la contrainte résolue est calculée à chaque pas de temps, sur les trois plans de clivage le long de 5 lignes de 10 points disposées tel qu'indiqué en Fig. V-26b.

La nouvelle version de Tridis-BCC v2.0 (DGR3, §IV-2.7) est maintenant utilisée dans la même configuration. Les résultats obtenus avec les lois de mobilité (« NL2 ») avec terme entropique et (« NL1 »), sans terme entropique, sont systématiquement comparées. Notons enfin que la vitesse de courbure imposée ici est 10 fois inférieure à celle des simulations de Chaussidon, soit $2 \cdot 10^8 \text{ m}^{-1}\text{s}^{-1}$, ce qui correspond à une vitesse de déformation plastique équivalente de l'ordre de 200s^{-1} .

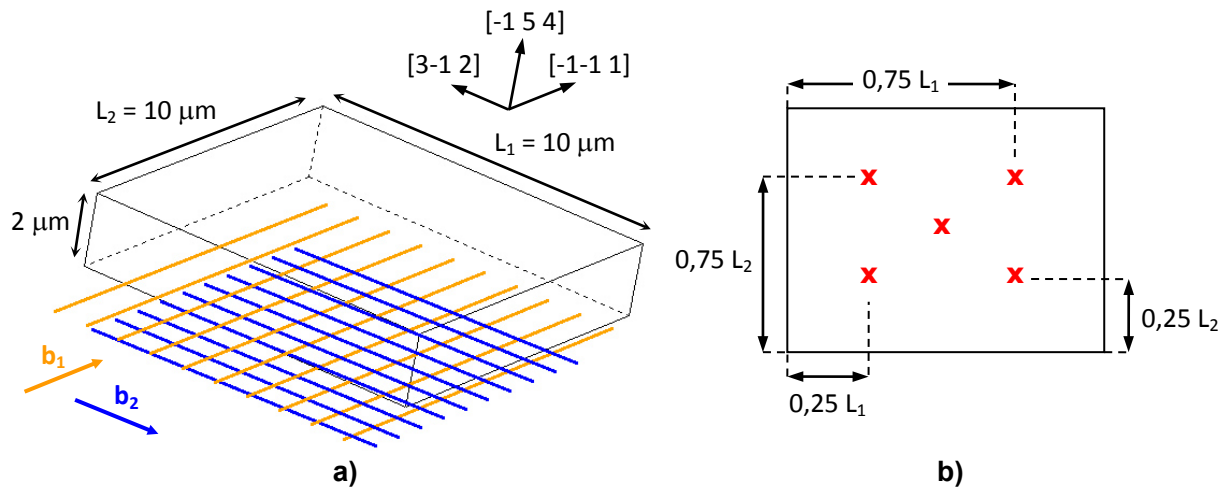


Fig. V-26 Simulations utilisées pour le calcul de l'évolution de la contrainte interne dans une latte de ferrite sollicitée en flexion : **a)** Configuration initiale des sources de dislocations dans le domaine virtuel ; **b)** Localisation des sites de calcul pour l'analyse de l'évolution de la contrainte avec le temps sur l'épaisseur de la latte : cinq lignes de dix points traversant la latte et disposées aux sites marqués dans la figure sont analysées.

4.2.2 Résultats et discussion

L'évolution de la contrainte résolue (σ^*) a été calculée de manière continue sur les trois plans de clivage [(100), (010), et (001)] et ce, en 50 points disposés le long de 5 lignes distinctes [Fig. V-26b]. Les évolutions complètes (nuages de points) sont reportées en Annexe D. Dans l'analyse ci-dessous, nous avons calculé la contrainte moyenne par plan de clivage, en séparant les côtés chargés en traction de ceux en compression. Par ailleurs, l'écrantage de la contrainte appliquée par le développement de la microstructure est analysé, en normalisant toutes les données par la valeur maximale de chaque cas (ce qui correspond à la valeur de $\sigma^*_{(001)}$ en début de simulation, à proximité des surfaces supérieure ou inférieure de la latte). Ces valeurs sont recueillies au Tableau V-3, pour chacun des 4 cas simulés.

	NL1		NL2	
	50K	200K	50K	200K
Max [$\sigma^*_{(001)}$] (MPa)	426	353	340	159

Tableau V-3 : Contrainte maximale résolue sur un plan de clivage relevée pour chacune des simulations.

L'évolution de la valeur moyenne de la contrainte résolue sur chaque plan de clivage est tracée en Fig. V-27, en comparant les lois de mobilité NL1 et NL2. Un premier constat, conforme aux résultats de Chaussidon [Fig. V-25], est la différence de niveau de contrainte selon le plan de clivage considéré. La contrainte interne charge progressivement le plan (100) alors qu'elle écranthe la contrainte appliquée dans le plan le plus sollicité (001). Cet effet d'écrantage est également visible dans le plan (010), mais de façon moins marqué que dans le plan (001).

A haute température (200K), l'introduction d'un terme entropique (NL2) accentue les effets décrits ci-dessus, concernant les plans (100) et (001). A contrario, aucun effet n'est visible sur les résultats obtenus à basse température (50K).

De manière générale, l'évolution des contraintes de clivage est plus progressive à basse température, et plus hétérogène à haute température. Cet effet est toutefois moins prononcé que dans les calculs de Chaussidon.

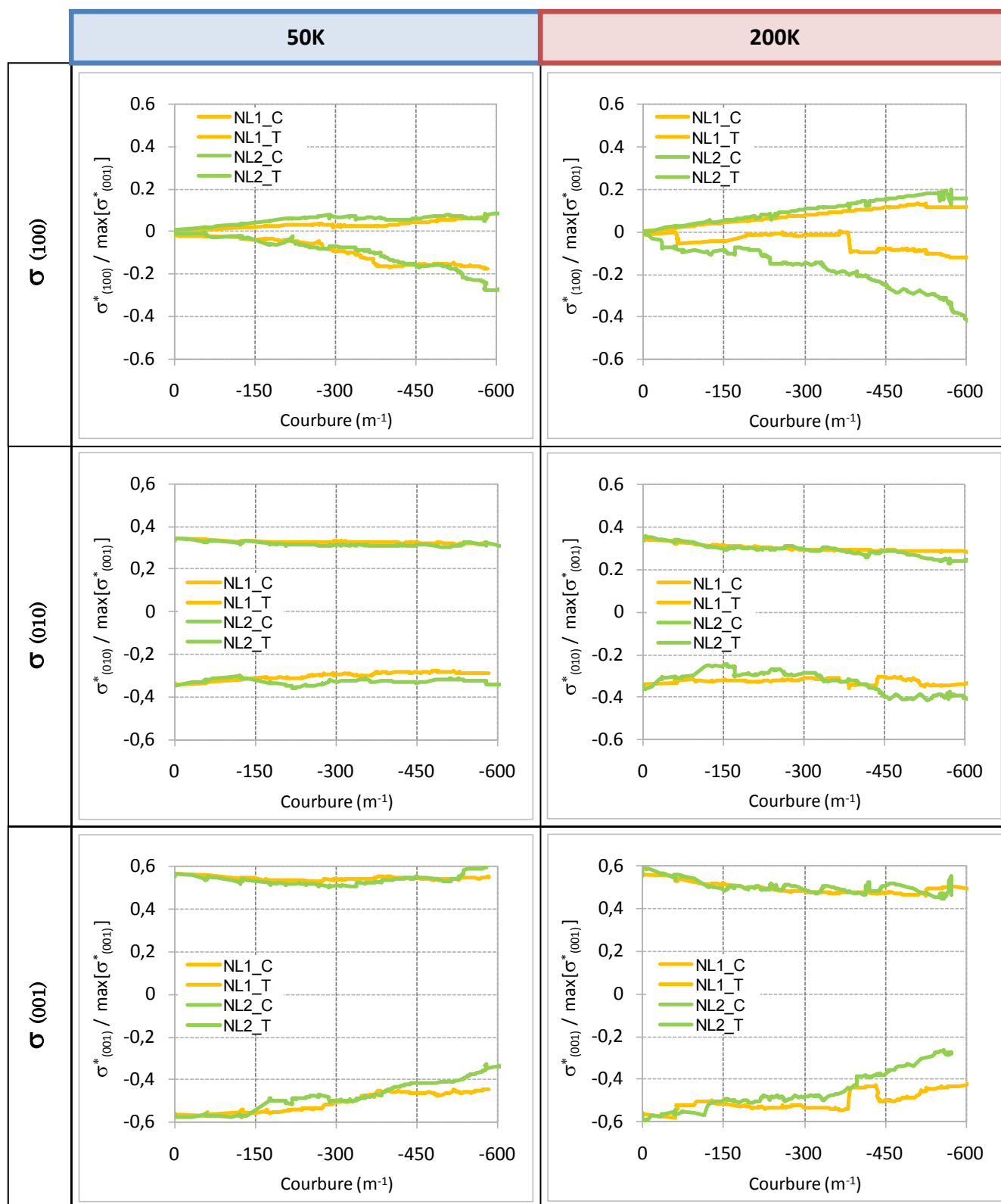


Fig. V-27 : Évolutions de la contrainte résolue (σ^*) sur les plans de clivage (001) et (100), à 50K et 200K en fonction de la courbure plastique, avec la loi de mobilité (NL2) et (NL1). Nous représentons ici l'évolution de la valeur moyenne de tous les points de calcul, normalisée par rapport à la contrainte maximale obtenue dans ces plans pour chaque simulation, soit le maximum de $\sigma^*_{(001)}$ [Tableau V-3].

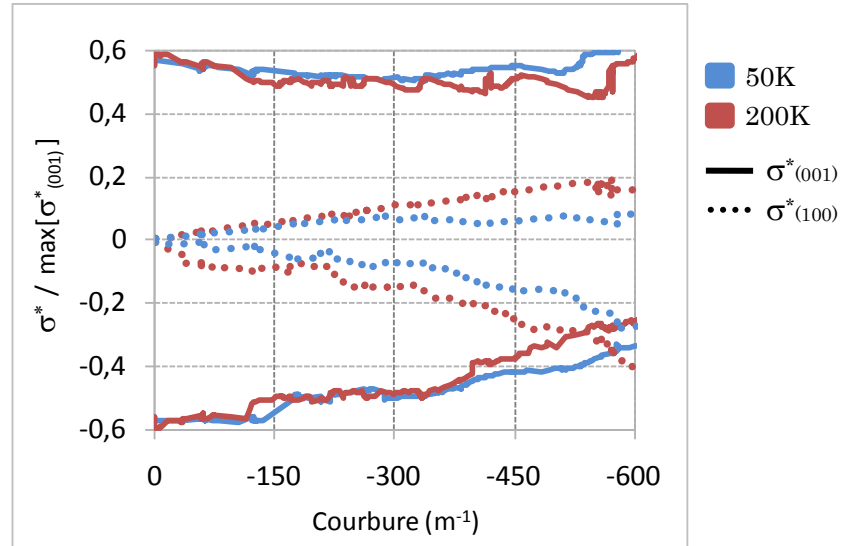


Fig. V-28 : Évolution de la contrainte résolue (σ^*) sur les plans de clivage (001) et (100) à 50K et 200K en fonction de la courbure plastique. Nous représentons ici l'évolution de la valeur moyenne de tous les points de calcul, normalisée par rapport à la contrainte maximale obtenue dans ces plans dans chaque simulation, soit le maximum de $\sigma^*_{(001)}$ [Tableau V-3].

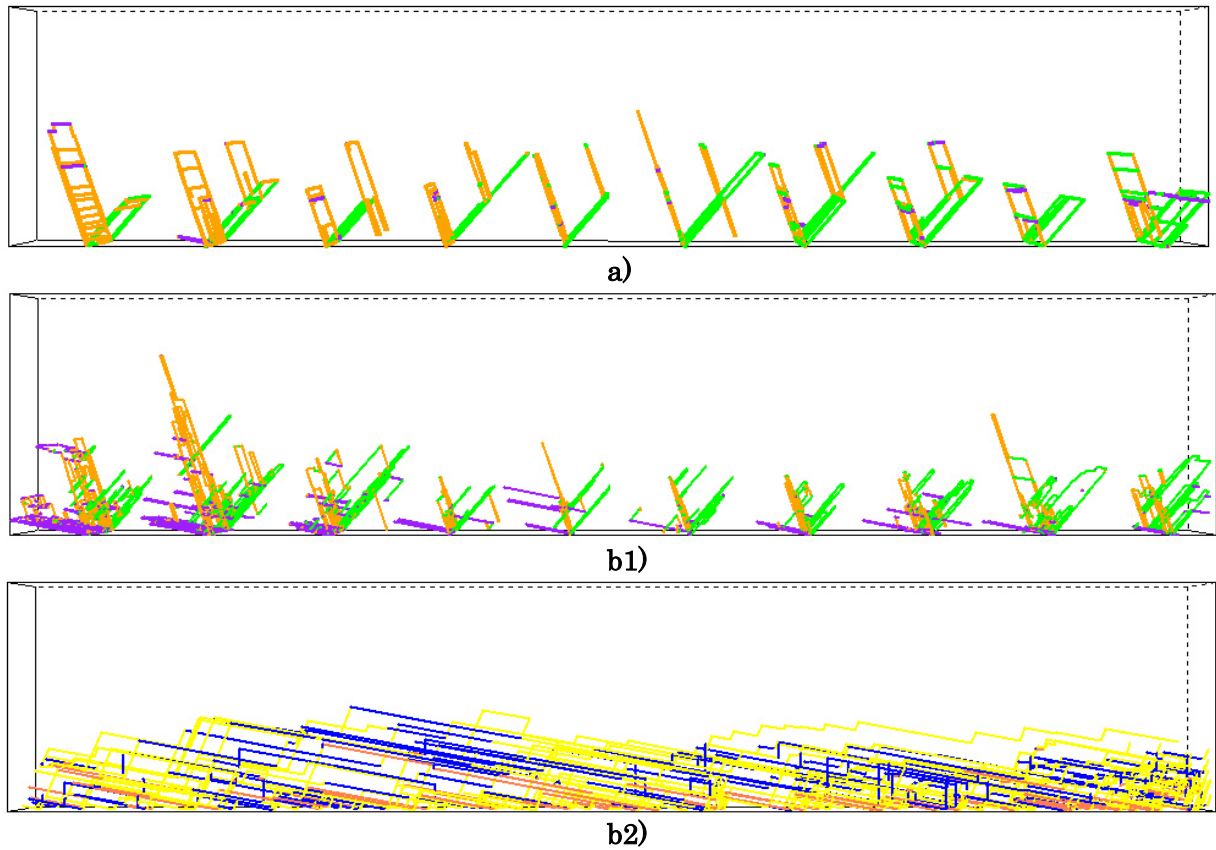


Fig. V-29 : Microstructure développée dans la latte pour une courbure plastique de 600 m^{-1} en utilisant la loi de mobilité e (NL2) : **a)** à 50K, **b)** à 200K, en séparant la famille de systèmes de vecteur de Burgers $[-1 -1 1]$ (**b1**) de celle de vecteur de Burgers $[-1 1 -1]$ (**b2**)

L'influence de la température est analysé sur la figure Fig. V-28 dans le cas du plan le plus chargé et sur celui le moins chargé, avec la loi NL2 (avec terme entropique). Ici encore, l'augmentation de la température favorise l'écrantage de la contrainte appliquée sur les plans (001), tandis qu'elle charge progressivement les plans (100). Par ailleurs, la contrainte de compression s'exerçant sur le plan (100) dépasse celle sur le plan (001), avant d'atteindre 600m^{-1} . La contrainte à laquelle cette inversion a lieu dépend vraisemblablement de la loi de mobilité utilisée [Fig. V-27] : avec NT1, l'importance relative de la contrainte interne est moindre qu'avec NT2.

Les différences de contrainte interne entre les simulations menées à 50K et celles à 200K (pour une même courbure plastique) sont liées au développement de leurs microstructures (de dislocations) respectives. Ainsi, à 200K la microstructure est beaucoup plus complexe qu'à 50K [Fig. V-29], avec une présence simultanée des deux familles de systèmes de glissement [Fig. V-29b1 et b2] et une évolution plus hétérogène. La simulation à 50K nécessiterait, pour dépasser les 600m^{-1} , une forte augmentation de la contrainte appliquée, de sorte à activer la deuxième famille de systèmes de glissement.

Bien qu'il ne s'agisse pas d'une étude approfondie, ces simulations montrent l'importance de l'évolution de la contrainte interne dans le phénomène de clivage des aciers ferritiques, ainsi que le rôle joué par la température. Dans le même temps, elles montrent les possibilités d'application du nouveau code Tridis-BCC v2.0, qui permet de simuler ces configurations jusqu'à des courbures proches de 800m^{-1} , pour plus de 40000 pas de calcul en moins de 3 jours. Finalement, ces simulations montrent également l'intérêt d'utiliser la loi de mobilité des segments vis contenant un terme entropique dès lors que l'on augmente la température, puisque les niveaux de contrainte nécessaires (pour une vitesse de déformation données) sont bien inférieurs.

5 Conclusion

Dans ce chapitre la transition de mobilité des dislocations vis dans le fer CC depuis le régime thermiquement activé vers le régime athermique a été abordée. Les deux cas limite suivants ont été examinés : transition à forte contrainte [§2], et transition à faible contrainte [§3]. Les modèles existants, qui extrapolent à forte contrainte les caractéristiques à faible contrainte du mouvement thermiquement activé [§2.2.4], ne permettent pas de décrire la transition de manière satisfaisante. Il alors été montré comment, la prise en compte du caractère fini de la vitesse des décrochements individuels [Fig. V-1] et la dépendance en contrainte de la longueur critique d'un dd [eq. (5.5)] permet de réaliser la transition souhaitée [§2, Fig. V-3, Fig. V-4, Fig. V-5 et Fig. V-6]. Cette modification permet de traiter correctement la dépendance de la mobilité à forte contrainte, en fonction de la longueur de la dislocation L [Fig. V-2].

Deux modèles ont ensuite été proposés, l'un reprenant essentiellement l'analyse de Hirth et Lothe [H&L, §2.2], l'autre en intégrant la fréquence de nucléation de dd du modèle vibrationnel de Guyot et Dorn dans le formalisme général de H&L [2.3]. Dans les deux cas, $\Delta G(\tau)$ est ajusté sous la forme d'une loi de Kocks (3.76) [Tableau V-1] à partir d'une nouvelle méthode, qui réduit le nombre de paramètres ad-hoc [§B]. Bien que ces modèles décrivent correctement transition à forte contrainte, ils ne parviennent pas à décrire la transition thermique/athermique à 300K, pour des valeurs de contrainte réalistes [Fig. V-4 et Fig. V-8].

Tout en conservant la formulation exponentielle [§3.2], une nouvelle expression de l'énergie d'activation ΔG [eq. (5.15)] a été proposée, incluant un terme de correction de type entropique [§3.4.2], et donc une dépendance en température de la hauteur (totale) de barrière [eq. (5.19), Fig. V-16 et Fig. V-17]. Nous avons conscience que ce point est très controversé, mais nous considérons que, dans le cadre particulier du mécanisme de franchissement de vallées de

Peierls par doubles décrochements, il n'y a pas de fondements théoriques ou expérimentaux suffisamment solides pour négliger cette contribution [§3.4.2].

Ainsi, bien que notre formulation du terme entropique soit simpliste, cet apport permet de réaliser la **transition vers le régime athermique en contrainte et en température** [Fig. V-10, Fig. V-12], et de traiter correctement la dépendance en longueur [Fig. V-11]. Cette formulation parvient de fait à reproduire les mesures de la mobilité à 298K effectuées par Urabe et Weertman (1975) [Fig. V-12], de même que les sauts de vitesse de déformation de Keh et Nakada (1968) [Fig. V-13], Arsenault (1964) [Fig. V-14], et Nakada et Keh (1968) [Fig. V-20]. Avec cette loi, la mobilité des dislocations vis est très inférieure à celle des dislocations coin à basse température, mais devient comparable à celle-ci, pour des contraintes relativement faibles à température ambiante [Fig. V-19], tel que suggéré par les observations MET [Fig. V-7].

La **valeur de τ_0** identifiée à partir des mesures de $\tau_y(T)$ ne correspond pas à τ_y lorsque $T \rightarrow 0$, mais plutôt à la contrainte critique nécessaire à entrer en régime athermique $\tau_c(T)$ [Fig. V-10b, Fig. V-16, et Fig. V-17]. La contrainte τ_0 retrouve ainsi sa signification physique d'origine, en tant que contrainte de Peierls [§III-3.2.4.5]. Cette dépendance en contrainte de l'énergie d'activation donne un **mouvement saccadé** lorsque la mobilité est thermiquement activée, et un **mouvement continu**, lorsque la mobilité est limitée par la friction visqueuse [§3.4.3.3]. Ce comportement est en accord avec les observations en MET in-situ réalisées sur le fer pur.

Finalement, nous avons utilisé les possibilités offertes par les nouvelles lois de mobilité et les améliorations apportées à Tridis-BCC [§IV] pour réaliser deux simulations **avec glissement dévié**, reproduisant la déformation plastique d'une latte de ferrite sollicitée en flexion [§4]. Dans la première simulation [§4.1], les caractéristiques du glissement dévié à basse (77K) et haute (293K) température sont analysées et comparées avec succès (qualitativement) aux observations Sestak et Libovicky (1963). Dans la deuxième simulation [§4.2], l'évolution de la contrainte interne avec la courbure plastique est analysée à 50K et 200K, dans les différents plans de clivage $\langle 001 \rangle$ et pour deux lois de mobilité NT1 (sans correction entropique) et NT2 (avec correction entropique). A 200K, la microstructure de dislocations qui se développe avec la loi NT2 écrante plus efficacement les contraintes favorisant le clivage que la microstructure qui se développe avec la loi NT1 [§4.2.2].

6 Références

- ARSENAULT, R. J. 1964. LOW-TEMPERATURE CREEP OF ALPHA IRON. *Acta Metallurgica*, 12, 547-&.
- CAILLARD, D. 2009. TEM in situ straining experiments in Fe at low temperature. *Philosophical Magazine Letters*, 89, 517-526.
- CAILLARD, D. & MARTIN, J. L. 2003d. Thermally activated core transformations. *Thermally activated mechanisms in crystal plasticity*. Oxford: Pergamon.
- CHAUSSIDON, J. 2007. *Etude multiéchelle de la plasticité du fer alpha à basse température*. Doctorat de l'INP Grenoble Thesis (PH D), Grenoble INP - ED "Matériaux et Génie des Procédés".
- CHAUSSIDON, J., FIVEL, M. & RODNEY, D. Year. The glide of screw dislocations in bcc Fe: Atomistic static and dynamic simulations. *In*, 2006. Pergamon-Elsevier Science Ltd, 3407-3416.
- CHAUSSIDON, J., ROBERTSON, C., FIVEL, M. & MARINI, B. 2010. Internal stress evolution in Fe laths deformed at low temperature analysed by dislocation dynamics simulations. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 18, 14.
- CHRISTIAN, J. W. 1983. SOME SURPRISING FEATURES OF THE PLASTIC-DEFORMATION OF BODY-CENTERED CUBIC METALS AND ALLOYS. *Metallurgical Transactions a-Physical Metallurgy and Materials Science*, 14, 1237-1256.
- CONRAD, H. & WIEDERSICH, H. 1960. ACTIVATION ENERGY FOR DEFORMATION OF METALS AT LOW TEMPERATURES. *Acta Metallurgica*, 8, 128-130.
- DORN, J. E. & RAJNAK, S. 1964. NUCLEATION OF KINK PAIRS + PEIERLS MECHANISM OF PLASTIC DEFORMATION. *Transactions of the Metallurgical Society of Aime*, 230, 1052-&.
- GRANATO, A. V., LUCKE, K., SCHLIPF, J. & TEUTONICO, L. J. 1964. ENTROPY FACTORS FOR THERMALLY ACTIVATED UNPINNING OF DISLOCATIONS. *Journal of Applied Physics*, 35, 2732-&.
- GUYOT, P. & DORN, J. E. 1967. A CRITICAL REVIEW OF PEIERLS MECHANISM. *Canadian Journal of Physics*, 45, 983-&.
- HIRTH, J. P. & LOTHE, J. 1982. Diffusive Glide and Climb Processes. *Theory of dislocations*. 2nd ed ed. New York ; Chichester: Wiley.
- KEH, A. S. & NAKADA, Y. 1968. YIELDING PLASTIC FLOW AND DISLOCATION SUBSTRUCTURE IN IRON SINGLE CRYSTALS. *Transactions of the Japan Institute of Metals*, S 9, 876-&.
- KOCKS, U. F., ARGON, A. S. & ASHBY, M. F. 1975a. Activation Enthalpy and Activation Entropy. *Thermodynamics and kinetics of slip*. Oxford: Pergamon Press.
- KOCKS, U. F., ARGON, A. S. & ASHBY, M. F. 1975b. Empirical Laws. *Thermodynamics and kinetics of slip*. Oxford: Pergamon Press.
- KOCKS, U. F., ARGON, A. S. & ASHBY, M. F. 1975d. Frequency factors and Activation Entropies. *Thermodynamics and kinetics of slip*. Oxford: Pergamon Press.
- KOCKS, U. F., ARGON, A. S. & ASHBY, M. F. 1975g. Profile Dependent on Temperature. *Thermodynamics and kinetics of slip*. Oxford: Pergamon Press.
- KOCKS, U. F., ARGON, A. S. & ASHBY, M. F. 1975h. *Thermodynamics and kinetics of slip*, Oxford, Pergamon Press.
- KURAMOTO, E., AONO, Y. & KITAJIMA, K. 1979. THERMALLY ACTIVATED SLIP DEFORMATION OF HIGH-PURITY IRON SINGLE-CRYSTALS BETWEEN 4.2-K AND 300-K. *Scripta Metallurgica*, 13, 1039-1042.
- MARIAN, J., CAI, W. & BULATOV, V. V. 2004. Dynamic transitions from smooth to rough to twinning in dislocation motion. *Nature Materials*, 3, 158-163.
- NAAMANE, S. 2008. *Etude de la déformation plastique de la ferrite à basse température: simulations de dynamique des dislocations*. Doctorat de l'Université Pierre et Marie Curie Thesis (PH D), Université Pierre et Marie Curie.
- NAKADA, Y. & KEH, A. S. 1968. SOLID SOLUTION STRENGTHENING IN FE-N SINGLE CRYSTALS. *Acta Metallurgica*, 16, 903-&.
- RONG, Z. W., BACON, D. & OSETSKY, Y. 2005b. Dynamics of drag of self-interstitial clusters by an edge dislocation in iron. *Materials Science and Engineering a-Structural Materials Properties Microstructure and Processing*, 400, 378-381.

- SCHOECK, G. 1965. ACTIVATION ENERGY OF DISLOCATION MOVEMENT. *Physica Status Solidi*, 8, 499-&.
- SEEGER, A. & SCHILLER, P. 1962. BILDUNG UND DIFFUSION VON KINKEN ALS GRUNDPROZESS DER VERSETZUNGSBEWEGUNG BEI DER MESSUNG DER INNEREN REIBUNG. *Acta Metallurgica*, 10, 348-&.
- SESTAK, B. & LIBOVICKY, S. 1963. TRANSITION TO CRYSTALLOGRAPHIC SLIP ON FE-3 PERCENT SI SINGLE CRYSTALS AT 78 DEGREES K. *Acta Metallurgica*, 11, 1190-&.
- SHIGESATO, G. 2007. *Development of dislocation structures in steels: Relation with the mechanical properties*. Doctorat de l'INP Grenoble Thesis (PH D), Grenoble INP - ED "Matériaux et Génie des Procédés".
- SHIMIZU, F., OGATA, S., YAMAGUCHI, M., KANO, T., KIMIZUKA, H., ITAKURA, M. & KABURAKI, H. 2007. First-principles Calculation on Core Structures and Peierls Stress of a Screw Dislocation in BCC Iron. In: KABURAKI, H. (ed.) *Annual Report of the Earth Simulator Center*. Japan Atomic Energy Agency.
- TANG, M., KUBIN, L. P. & CANOVA, G. R. 1998. Dislocation mobility and the mechanical response of BCC single crystals: A mesoscopic approach. *Acta Materialia*, 46, 3221-3235.
- TERENTYEV, D., BACON, D. J. & OSETSKY, Y. N. 2008a. Interaction of an edge dislocation with voids in alpha-iron modelled with different interatomic potentials. *Journal of Physics-Condensed Matter*, 20, 11.
- URABE, N. & WEERTMAN, J. 1975. DISLOCATION MOBILITY IN POTASSIUM AND IRON SINGLE-CRYSTALS. *Materials Science and Engineering*, 18, 41-49.

Chapitre VI : Conclusions et Perspectives

Table des matières

Chapitre VI : Conclusions et Perspectives.....	159
1 Conclusions.....	161
2 Perspectives.....	163
2.1 Identifier les lois de mobilité des dislocations vis.....	163
2.2 Améliorer la loi de glissement dévié.....	164
2.3 Le développement de codes de dynamique des dislocations	164
2.4 Les applications envisageables de Tridis-BCC v2.0.	164
3 Références.....	165

1 Conclusions

Ces travaux de thèse s'inscrivent au sein d'une **démarche** de simulation et expérimentation **multi-échelles** visant à améliorer la compréhension de la fragilisation par l'irradiation de l'acier de cuve [§A].

Au niveau de la dynamique des dislocations (DD), la grande complexité métallurgique de l'**acier de cuve** est réduite à l'étude d'une des **lattes de ferrite** à la base de sa microstructure bainitique revenue [§II-4]. Or, l'étude du fer CC en DD présente déjà des nombreuses difficultés, qui n'avaient pas été traitées jusqu'à présent. Dans ce sens, ce travail de thèse a porté essentiellement sur l'amélioration de la prise en compte des spécificités du fer CC dans le code de DD Tridis BCC, dont notamment :

- Les lois de mobilité des dislocations, avec une attention tout particulière portée sur les parties vis et l'activation thermique [§III et §V]
- La gestion du mouvement des dislocations de lorsqu'on admet le glissement dévié avec une loi de mobilité exponentielle [§IV]

En ce qui concerne les **lois de mobilité des dislocations dans le fer CC**, une des entrées de base pour tout code de dynamique des dislocations (DD), nous avons revu en détail tous les modèles disponibles, en distinguant deux régimes bien distincts :

- Un régime dit athermique ou dynamique, dans lequel la vitesse des dislocations est proportionnelle à la contrainte selon une loi de type visqueux [§III--]
- Un régime dit thermique, dans lequel les dislocations n'ont pas suffisamment d'énergie pour franchir le Potentiel de Peierls de façon dynamique [§III-3.1], et dont le mouvement est assisté par l'activation thermique. L'expression de la vitesse qui en résulte varie de façon exponentielle en contrainte selon une loi d'Arrhenius [§III -3].

Dans le **régime athermique** nous avons montré que, contrairement aux matériaux CFC, les mécanismes de phonons dus à l'anharmonicité des cristaux (notamment le « vent de phonons ») ne permettent pas d'expliquer la viscosité observée **dans le fer CC** [§III -2.4]. Dans, le cas des dislocations vis [§III -2.4.1], un modèle théorique à partir de la diffusion Raman et la friction radiative permet de reproduire les observations de Urabe et Weertman. Ceci n'est toutefois pas le cas des dislocations coin [§III-2.4.2], dont nous supposons que des mécanismes tels que l'influence des impuretés sont à l'origine de cette importante friction.

Dans le cas où la **mobilité thermiquement activée** des dislocations vis contrôle la plasticité, nous avons étudié l'ensemble des modèles disponibles dans le cadre du formalisme de Peierls-Nabarro [§III-3], dont ceux de double décrochements (dd) développés par Guyot et Dorn (G&D) et Hirth et Lothe (H&L), et le mécanisme de « locking-unlocking » proposé plus récemment par Caillard. Bien que jusqu'à présent seul le modèle de G&D ait été utilisé en DD [§III-3.6], nous avons mis en évidence ses limitations dès lors qu'on s'approche du régime athermique.

Pour aborder ce problème en partant des modèles existants, nous l'avons divisé en deux parties indépendantes [§V], en analysant d'une part une transition dans le régime athermique aux fortes contraintes, et d'autre part une transition à haute température.

Il a été ainsi montré que la prise en compte du caractère fini de la vitesse des décrochements individuels et de la dépendance en contrainte de la longueur critique d'un dd permet de réaliser la **transition à forte contrainte** [§V-2]. La description retenue s'accompagne d'une perte de la dépendance en longueur L de la mobilité des vis. Deux modèles ont ainsi été proposés, l'un reprenant essentiellement l'analyse de H&L [§V-2.2], l'autre combinant les avantages des modèles de H&L et G&D [§V-2.3]. Dans les deux cas, nous utilisons un nouvel ajustement empirique de l'énergie d'activation $[ΔG(τ)]$ sous la forme d'une loi de Kocks, obtenu par une nouvelle méthode, faisant intervenir la dérivée de la limite d'élasticité par rapport à la température [§B].

Par la suite, il a été montré que les modèles présentées ne permettent pas de réaliser la transition aux **températures élevées** [§V-3.2] en utilisant une expression de Kocks pour ΔG . Une nouvelle expression de l'énergie d'activation a donc été proposée, en rajoutant un **terme de correction entropique** [§V-3.3]. Bien que cette approche ne soit pas conventionnelle, nous considérons d'une part qu'il n'y a pas de fondements théoriques ou expérimentaux suffisamment solides pour négliger cette contribution [§V-3.4], et d'autre part qu'à l'inverse des autres modèles, cette approche originale permet de reproduire un certain nombre de **résultats expérimentaux importants**.

Ainsi, notre modèle complet permet de réaliser la transition vers le régime athermique aussi bien en contrainte qu'en température [§V-3.3.4]. Cette approche permet de reproduire raisonnablement bien les mesures de la mobilité des vis dans le régime dynamique à 298K en même temps que les sauts de vitesse de déformation [§V-3.3.4.2, §V-3.5], utilisés couramment pour déterminer les paramètres d'activation. Avec ce modèle, la mobilité des dislocations vis est toujours très inférieure à celle des dislocations coin à basse température, mais devient comparable à celle-ci pour des contraintes relativement faibles à température ambiante, en accord avec des observations MET. De plus, ce nouveau formalisme pourrait contribuer à expliquer des questions qui restent très débattues telles que :

- la différence entre les extrapolations de la limite d'élasticité à 0K et la valeur théorique de la contrainte de Peierls [§V-3.4.3.2],
- les différentes cinétiques observées en MET in-situ sur les dislocations dans le fer pur, avec un mouvement saccadé à basse température lorsque qu'il est thermiquement activé, et un mouvement continu à température ambiante lorsque les dislocations se déplacent de manière athermique [§V-3.4.3.3].

Le deuxième volet de cette thèse concerne l'**amélioration du code de calcul Tridis-BCC** en soit [§IV] et a donné lieu à la nouvelle version Tridis-BCC v2.0. Ce travail a porté essentiellement sur trois aspects :

- Une remise à niveau générale, du point de vue de la programmation.
- L'amélioration de la gestion des segments de dislocation.
- L'amélioration des performances du code.

Concernant la **remise à niveau** de Tridis-BCC [§C] nous avons soigné particulièrement la lisibilité de l'écriture des différentes routines. Cela a permis d'améliorer la **gestion des segments de dislocation** [§IV-2], avec notamment une plus complète gestion des intersections, et l'introduction de pas de temps physiques pour les segments à caractère vis et coin. Ces changements ont à leur tour permis d'éviter la plupart des instabilités constatées dans les simulations précédentes.

En ce qui concerne **les performances du code** [§IV-3], notre travail a porté sur deux actions, l'utilisation des bibliothèques mathématiques BLAS et l'introduction d'un nouvel algorithme pour le calcul des contraintes à longue portée. Au final, des gains de temps considérables (d'une semaine à quelques heures) ont pu être obtenus en combinant l'algorithme à longue portée aux améliorations de la gestion de segments.

Par ailleurs, tout au long de cette démarche nous avons essayé de rendre Tridis-BCC **aussi flexible que possible** [§C-6]. Cette flexibilité, associée à la facilité de modification, fiabilité, et performances, ont permis de réaliser dans le dernier mois de la thèse trois exemples d'application du code mettant en jeu l'essentiel des développements réalisés lors de cette thèse.

La première application concerne l'étude de **validation de la loi de mobilité des dislocations vis** [§V-3.5] : en conditions périodiques, avec une sollicitation en cisaillement pur, et sans glissement dévié.

La deuxième et troisième application simulent une **latte de ferrite en flexion** avec la prise en compte du glissement dévié et de la nouvelle loi de mobilité des vis :

- Dans la première simulation [§V-4.1] nous avons exploré les caractéristiques du glissement dévié à basse (77K) et haute (293K) température, qui ont été comparées avec succès à des observations expérimentales correspondantes.
- Dans la deuxième simulation [§V-4.2] nous avons montré l'importance de la nouvelle loi de mobilité des vis pour prédire les contraintes favorisant le clivage à 50K et 200K. La microstructure qui se développe à haute température permet de diminuer efficacement la contrainte s'exerçant sur les plans de clivage, et ceci d'autant plus que la loi de mobilité intègre un terme de correction entropique.

2 Perspectives

Quatre axes de recherche sont envisagés pour continuer ce travail. Ils concernent :

- une identification expérimentale et numérique (à l'échelle atomique) de la loi de mobilité des dislocations vis,
- une amélioration de la loi de glissement dévié,
- de nouveaux développements du code de dynamique de dislocations (DD) Tridis et aNumodis,
- les applications directes à envisager pour le nouveau code.

2.1 Identifier les lois de mobilité des dislocations vis.

La loi de mobilité ici proposée [§V-3.3] permet de reproduire un certain nombre d'observations expérimentales et présente un intérêt pratique pour les codes de dynamique de dislocations. Elle comporte toutefois un certain nombre de paramètres ajustés, dont le sens physique doit être exploré plus avant.

Au niveau expérimental, il serait intéressant d'étudier de plus près les hypothèses réalisées en [§V-3.4], ainsi que le domaine de transition vers le régime athermique en contrainte [§V-2] et température [§V-3]. Pour ce faire, il serait souhaitable de produire à nouveau des monocristaux de fer comme en Tanaka *et al.* (2008), pour l'étude de la transition fragile-ductile. En effet, tous les résultats expérimentaux utilisés ici datent de plusieurs décennies. Il serait à présent souhaitable, par exemple, de réaliser des essais mécaniques sur monocristaux à des vitesses de déformation plus importantes que dans le passé [§V-3.4], ainsi que des observations in-situ et des mesures de la vitesse des dislocations sur plusieurs nuances et à plusieurs températures, afin de vérifier et d'élargir les études de Urabe et Weertman (1975) [§III-2.4, §V-3.3.4.2].

A l'échelle de la Dynamique Moléculaire (DM) on pourrait tenter d'analyser plus en détails la contribution de l'entropie sur le mécanisme des doubles décrochements. Sur ce point, il serait intéressant de disposer de potentiels capables de rendre compte du magnétisme du fer, comme le suggère les travaux de Hasegawa *et al.* (1985). Par ailleurs, des études sur l'influence des impuretés en solution solide (Clouet *et al.*, 2008, Zhang *et al.*, 2010) seraient un complément utile aux mesures expérimentales de la vitesse des dislocations dans le régime dynamique. Ces études permettraient d'améliorer la description du terme visqueux des lois de mobilité dans le fer CC [§III-2.4].

Dans tous les cas, tant les études expérimentales que celles en DM doivent être réalisées en étroite relation avec les possibilités et besoins des codes de DD, afin de valider les choix arrêtés. Toujours en DD, les paramètres d'activation peuvent être testés en réalisant des simulations de sauts de température supplémentaires, complément les sauts de vitesse de déformation ici présentés [§V-3.5.2].

2.2 Améliorer la loi de glissement dévié

Un effort important a été consacré à améliorer le fonctionnement du glissement dévié dans Tridis-BCC, d'un point de vue géométrique [IV-2]. Nous avons également introduit des outils qui permettent de différencier les deux régimes, basse et haute température [§V-4.1]. Il serait intéressant de modifier l'algorithme de temps de résidence utilisé pour la description physique du glissement dévié, en réalisant une étude systématique de l'influence de la température et la vitesse de déformation sur ce mécanisme. Comme pour la loi de mobilité, il serait nécessaire de combiner études expérimentales (pour compléter la revue de Christian (1983)) et simulations en DM.

2.3 Le développement de codes de dynamique des dislocations

La nouvelle méthode des boîtes [§IV-3.3.2] permet d'accélérer significativement les calculs Tridis [§IV-3.4]. Il reste possible d'accélérer ce code à partir de la méthode des boîtes décrite au Chapitre IV notamment en :

- développant un algorithme auto-adaptatif de la taille des boîtes (taille de boîte variable dans le temps et l'espace du volume de simulation).
- parallélisant les calculs de la contrainte à longue portée, pour tirer profit de l'architecture des processeurs modernes.

En termes de charge de travail, la deuxième alternative semble relativement plus facile à réaliser que la première. De plus, un algorithme auto-adaptatif risque d'être plus difficile à paralléliser.

Les limitations intrinsèques aux codes vis-coin en général, et de Tridis-BCC en particulier ont motivé le développement du code nodal parallèle aNumodis en cours de programmation entre les équipes du CEA et du SiMAP. Ainsi, en ce qui concerne les applications pour matériaux CC, la formulation nodale d'aNumodis présente au moins deux avantages :

- L'utilisation d'un schéma d'intégration semi-implicite, devrait permettre de mieux contrôler les grandes différences de mobilité des dislocations, lorsqu'on utilise des lois de mobilité de type exponentielles [§IV-2.5.2.3].
- La flexibilité dans la définition de dislocations mixtes quelconque devrait rendre possible tout type de jonctions, et permettre de mieux étudier les interactions avec des défauts (notamment les boucles interstitielles produites sous irradiation [§A]).

Il faudra enfin aborder le problème des lois de mobilité propres aux segments mixtes, adaptés aux cristaux CC.

2.4 Les applications envisageables de Tridis-BCC v2.0.

Au Chapitre V, il a été montré que le code Tridis-BCC v2.0 est opérationnel et peut servir à traiter un certain nombre de problèmes d'intérêt pratique [§V-4].

Parmi les différentes possibilités, mentionnons :

- Poursuivre l'étude de l'acier de cuve 16MND5 en dynamique de dislocations.
 - Pour fins d'analyse, il serait utile de comparer les résultats de la présente étude obtenus en flexion, à des simulations en traction.
 - Examiner l'effet de la géométrie de latte (bainite supérieure ou inférieure, par exemple) [§II-4]. Sur ce point, des simulations de DD pourraient être mises en œuvre pour déterminer la configuration la plus défavorable, par rapport à l'évolution des contraintes de clivage.

- Étudier l'effet de l'irradiation (boucles d'interstitiels, cavités [§A-2]), avec et sans présence de carbures intra-latte, les « lois de mélange » qui en résultent, en les comparant à celles utilisées actuellement dans les recommandations du RCC-M (2007) [§A-4.2]. En ce sens, toujours pour fins d'analyse, il pourrait être intéressant de revoir les observations de Kitajima *et al.* (1982) sur des monocristaux de fer irradiés [§A-4.1.2] voire, de lancer des nouvelles campagnes expérimentales d'irradiation de monocristaux.
- Rajouter le couplage aux codes d'éléments finis (déjà présent dans les versions CFC du code) pour étudier une fissure dans la lignée des travaux 2D de Romero *et al.* (2008).

Ces travaux de thèse peuvent également servir à l'étude d'autres aciers ferritiques, envisagés pour de futures applications nucléaires. Ainsi par exemple, Tridis-BCC v2.0 est à présent utilisé pour l'étude des aciers ODS et la plasticité cyclique des aciers ferritiques, par différentes équipes de l'IGCAR (Kalpakam, Inde).

3 Références

- AFCEN 2007. Règles de conception et de construction des matériels mécaniques des îlots nucléaires REP (RCC-M). *Tome II - Matériaux 1ère partie*. Paris: AFNOR.
- CHRISTIAN, J. W. 1983. SOME SURPRISING FEATURES OF THE PLASTIC-DEFORMATION OF BODY-CENTERED CUBIC METALS AND ALLOYS. *Metallurgical Transactions A-Physical Metallurgy and Materials Science*, 14, 1237-1256.
- CLOUET, E., GARRUCHET, S., NGUYEN, H., PEREZ, M. & BECQUART, C. S. 2008. Dislocation interaction with C in [alpha]-Fe: A comparison between atomic simulations and elasticity theory. *Acta Materialia*, 56, 3450-3460.
- HASEGAWA, H., FINNIS, M. W. & PETTIFOR, D. G. 1985. A CALCULATION OF ELASTIC-CONSTANTS OF FERROMAGNETIC IRON AT FINITE TEMPERATURES. *Journal of Physics F-Metal Physics*, 15, 19-34.
- KITAJIMA, K., ABE, H., AONO, Y., KURAMOTO, E. & TAKAMURA, S. 1982. EFFECTS OF LOW-TEMPERATURE NEUTRON-IRRADIATION ON THE MECHANICAL-PROPERTIES OF BCC METALS. *Journal of Nuclear Materials*, 108, 436-441.
- ROMERO, I., SEGURADO, J. & LLORCA, J. 2008. Dislocation dynamics in non-convex domains using finite elements with embedded discontinuities. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 16.
- TANAKA, M., TARLETON, E. & ROBERTS, S. G. 2008. The brittle-ductile transition in single-crystal iron. *Acta Materialia*, 56, 5123-5129.
- URABE, N. & WEERTMAN, J. 1975. DISLOCATION MOBILITY IN POTASSIUM AND IRON SINGLE-CRYSTALS. *Materials Science and Engineering*, 18, 41-49.
- ZHANG, H. L., PUNKKINEN, M. P. J., JOHANSSON, B., HERTZMAN, S. & VITOS, L. 2010. Single-crystal elastic constants of ferromagnetic bcc Fe-based random alloys from first-principles theory. *Physical Review B*, 81.

Annexes

A.	Étude bibliographique sur l'endommagement par irradiation de l'acier de cuve	169
B.	Ajustement empirique de l'énergie d'activation	203
C.	Remise à niveau de Tridis CC.....	213
D.	Évolution de la contrainte interne (détail).....	221
E.	Champ de contrainte d'un segment de dislocation à longue distance.....	223
F.	Valeurs numériques pour le calcul des coefficients de friction visqueuse	225

A. Étude bibliographique sur l'endommagement par irradiation de l'acier de cuve

Table des matières

A. Étude bibliographique sur l'endommagement par irradiation de l'acier de cuve.....	169
A.1 Introduction.....	170
A.2 Nanostructure d'irradiation de l'acier de cuve.....	170
A.2.1 Simulations.....	171
A.2.1.1 Dynamique moléculaire (« DM »).....	171
A.2.1.2 Simulations cinétiques (« KMC »-« RT »).....	173
A.2.1.3 Précipitation.....	175
A.2.2 Observations.....	175
A.2.2.1 Diffraction de neutrons aux petits angles (« SANS »).....	175
A.2.2.2 Spectroscopie d'annihilation de positrons (« PAS »).....	176
A.2.2.3 Sonde atomique à électrode local (« LEAP »).....	177
A.2.2.4 Microscope électronique à transmission (MET).....	178
A.2.3 Discussion.....	181
A.3 Interactions défauts/dislocation.....	182
A.3.1 Dislocations coin.....	182
A.3.1.1 Cas des nanocavités.....	182
A.3.1.2 Cas des boucles de dislocation.....	183
A.3.1.3 Comparaison entre les différents obstacles.....	187
A.3.2 Dislocations vis.....	188
A.3.2.1 Boucles avec $b = \frac{1}{2}\langle 111 \rangle$	188
A.3.2.2 Boucles avec $b = \langle 100 \rangle$	189
A.3.2.3 Comparaison entre les boucles avec $b = \langle 100 \rangle$ et celles avec $b = \frac{1}{2}\langle 111 \rangle$	190
A.4 Comportement macroscopique à l'état irradié.....	191
A.4.1 Effets de l'irradiation sur la réponse en traction.....	191
A.4.1.1 Acier de cuve.....	191
A.4.1.2 Monocristaux de fer à basse température.....	193
A.4.2 Effets sur la ténacité du matériau.....	195
A.5 Références.....	197

A.1 Introduction

Cette annexe recueille l'analyse bibliographique réalisée lors de ces travaux de thèse à propos de la nature de l'endommagement par l'irradiation de l'acier de cuve [§A.2], l'état de l'art dans la compréhension des interactions dislocation-défaut dans le fer CC [§A.3], et finalement l'impact sur les propriétés macroscopiques observées sur ce type de matériau [§A.4]. Bien que finalement nous ne nous en sommes pas servi nous-mêmes, ceci pourrait être utile pour des travaux futurs qui essaieraient d'utiliser les outils mis en place ici à cette problématique.

A.2 Nanostructure d'irradiation de l'acier de cuve

Les paramètres d'irradiation dans les conditions de service des aciers de cuve sont :

- une température de fonctionnement de $290 \pm 30^\circ\text{C}$,
- des doses en fin de vie inférieure à 0,08 dpa (Eason et al., 1996).
- un flux neutronique de $0,05 \text{ à } 5 \cdot 10^{15} \text{ nm}^{-2}\text{s}^{-1}$ ($5 \cdot 10^{-12} \text{ à } 5 \cdot 10^{-10} \text{ dpa/s}$)

Il est communément admis que l'irradiation n'a que peu d'influence sur la microstructure bainitique ou sur la distribution des carbures (Odette and Wirth, 1997). Le décalage de la température de transition ductile-fragile et l'augmentation de la limite d'élasticité observés sont donc induits par l'évolution de la structure du matériau à une plus fine échelle (« nanostructure »). La nature exacte des objets ou des mécanismes responsables de la fragilisation sont encore débattus, mais de manière générale on retrouve :

- des précipités nanométriques induits par l'irradiation,
- des défauts du réseau (cavités, boucles de dislocations, *etc.*),
- des régions d'enrichissement en solutés et des ségrégations aux interfaces.

Par ailleurs, le rôle du cuivre dans l'alliage est souvent considéré comme prédominant vis-à-vis de l'irradiation, avec des propriétés mécaniques qui se dégradent très vite pour des teneurs plus élevées. Ce constat ayant été fait expérimentalement depuis des décennies, les fabricants d'acier de cuve ont fourni progressivement des aciers de plus en plus appauvris dans cet élément, ce qui a conduit à un parc mondial de centrales dont la teneur en cuivre des cuves varie sensiblement d'une génération à l'autre, et d'un pays à l'autre.

Une première description grossière des éléments nano-structuraux à l'origine de la fragilisation doit donc tenir compte de ce facteur. Ainsi :

- Pour aciers de cuve à plus de 0,3% de cuivre.
 - o Le cuivre précipite lors du traitement thermique à 600°C dans l'élaboration de l'acier, avant irradiation, et ce sont ces précipités qui constituent l'élément limitant du comportement mécanique de l'acier même après irradiation (Odette, 1995, 1998, Odette and Lucas, 1998, Eason et al., 1998).
- Pour aciers de cuve entre 0,1% et 0,3% de cuivre.
 - o La diffusion induite par l'irradiation permet la formation rapide de précipités riches en Cu (Cu-rich-precipitates, CuRP) (Odette, 1995, 1998, Odette and Lucas, 1998, 2001), alliés avec du manganèse (Mn), du nickel (Ni) et du silicium (Si), auxquels on attribue la fragilisation. On distingue :
 - Les aciers riches en Nickel (Ni) ont plus de Ni et Mn dans les CuRP.
 - Dans ceux riches en Ni-Mn et/ou pauvres en Ti et Cu, des précipités riches en Mn-Ni (Mn1P) pouvant croître très rapidement, remplacent les CuRP. Le Cu joue probablement un rôle de catalyseur.
- Pour les aciers de cuve à faible teneur en Cu ($< 0,1\%$) – le cas français.
 - o On retrouve toujours des MnP associés au Si et d'autres éléments d'alliage, mais leur taille et nombre sont souvent trop faibles pour qu'on puisse leur attribuer le changement de propriétés observé.
 - o La fragilisation est généralement attribuée à des défauts du réseau cristallin (Odette, 1995, 1998, Odette and Wirth, 1997, Odette and Lucas, 1998, Fisher et al., 1985). Parmi ce type de défauts on distingue :

- Les défauts instables thermiquement : des petits amas de lacunes qui se dissolvent sous irradiation et ne fragilisent donc pas le matériau.
- Les défauts stables thermiquement : jugés responsables de la fragilisation de l'alliage. Cette fragilisation sera :
 - décroissante avec une température croissante.
 - indépendante du flux neutronique.
 - proportionnelle globalement à $\sqrt{\phi t}$ (ϕ : flux neutronique).
- Parmi les défauts stables on cite souvent 3 types (Odette, 1995, 1998, 1998, Wirth et al., 1997, Masters, 1965, Eyre and Bartlett, 1965, Jenkins et al., 1978, Hoelzer and Ebrahimi, 1995, Robertson et al., 1982, Fujii and Fukuya, 2005) :
 - des complexes nano-cavité/soluté pseudo-stables et nucléés à partir d'amas plus petits.
 - des atmosphères relativement diluées de solutés comme le Mn ou le Ni, formées par ségrégation lors des cascades, au cœur desquelles il pourrait y avoir d'amas de lacunes ou des nano-cavités.
 - des complexes d'amas/solutés/boucles d'atomes interstitiels (*Self-Interstitial Atoms*, SIA).

Puisque l'acier de cuve utilisé dans la majorité des centrales américaines et japonaises est relativement riche en Cu (typiquement A533B), il n'est pas surprenant qu'un grand nombre d'études scientifiques aient été consacrés à ce problème. Cependant, la nuance française 16MND5, bien qu'ayant une microstructure bainitique proche du A533B, se caractérise par une teneur réduite dans cet élément. Le 16MND5 étant le matériau d'intérêt en France, on restera à l'écart de la problématique des précipités enrichis en Cu, pour se consacrer aux défauts du réseau cristallin tels que les nano-cavités ou les boucles de SIA. Pour obtenir les informations précises à ce sujet, de nombreux moyens d'observation et simulation ont été mis en jeu depuis plusieurs décennies. Récemment, au niveau européen lors du programme de recherche PERFECT, auquel tant le CEA que l'INPG ont participé activement.

Par la suite, nous passerons en revue les différents résultats, parfois contradictoires, disponibles dans la littérature à propos des défauts d'irradiation dans les alliages ferritiques, en nous concentrant en priorité sur les aciers de cuve à très faible teneur en cuivre.

A.2.1 Simulations

En ce qui concerne l'évolution sous irradiation de la nanostructure, la simulation apporte tout d'abord des informations à des échelles d'espace et de temps difficilement accessibles, voir inaccessibles, aux moyens d'observation disponibles. C'est le cas par exemple de l'étude en DM de l'endommagement primaire associé aux cascades de déplacement (~ 1 ns) qui se produisent lorsqu'un neutron vient heurter un atome (Gibson et al., 1960, Erginsoy et al., 1964, Guinan and Kinney, 1982, Bacon et al., 1993, 2000, Spaczer et al., 1994, Phythian et al., 1995, Delaye and Ghaleb, 1997, Stoller et al., 1997, Becquart et al., 2000, 2001). Cependant, d'autres modèles comme le KMC, RT, ou des modèles de précipitation sont capables de prédire l'évolution de cet endommagement sur plusieurs années.

A.2.1.1 Dynamique moléculaire (« DM »)

La technique

Dans notre champ d'étude, les simulations en dynamique moléculaire (*Molecular Dynamics*, DM) prédisent la trajectoire au cours du temps d'un ensemble d'atomes représentés de manière simplifiée par leur masse en tant qu'objets ponctuels. Les interactions entre atomes faisant évoluer le système sont régies par un potentiel dont découlent les forces exercées par les particules les unes sur les autres. Ces potentiels semi-empiriques, sont ajustés pour obtenir des propriétés physiques déterminées expérimentalement (ex : paramètre de maille, coefficient élastique, etc.) et constituent une entrée du problème. Le modèle physique étant ainsi défini, on utilise les lois de Newton pour calculer les positions et quantités de mouvement

des atomes à chaque pas de temps. On peut ainsi considérer la DM comme une expérience virtuelle donnant l'accès à des phénomènes à l'échelle atomique, telles que l'évolution des cascades de déplacement ou les interactions entre un défaut d'irradiation et une dislocation.

Avec les progrès incessants au niveau des supercalculateurs et la parallélisation des codes de calcul, la taille des simulations atteignables en DM est toujours croissante. Récemment, la barrière du trillion d'atomes (10^{12} atomes ~ 2.5 nm de côté d'un cristal cubique) a été atteinte avec le code SPaSM (*Scalable Parallel Short-range Molecular dynamics*) sur le système BlueGene/L de Los Alamos National Laboratory (soit 212 992 processeurs IBM PowerPC440 à 700 MHz). Sur ce type de configurations, simuler 10^{10} atomes pendant une nanoseconde prend quelques semaines, avec des pas de calcul inférieurs à la picoseconde. La plupart des calculs réalisés restent cependant plus modestes, et, de manière générale, font intervenir plusieurs millions d'atomes sur des durées de l'ordre de la nanoseconde.

Par la suite, nous présentons quelques résultats concernant l'endommagement primaire des alliages ferritiques par irradiation.

Résultats

Des simulations de DM montrent comment les cascades de déplacement dans les matériaux cubiques centrés (CC) forment une grande quantité d'**amas de défauts (lacunaires et interstitiels) invisibles en MET** en moins de 0,1 ns (Osetsky et al., 1999, 2000a, Stoller, 2000). Les simulations DM (Osetsky et al., 1999, 2000a, Stoller, 2000, Marian et al., 2002a) et ab-initio (Fu et al., 2005) montrent en outre qu'un grand nombre d'entre eux est très mobile à température ambiante. Certaines simulations (Soneda et al., 2001) prévoient l'apparition de défauts de taille nanométrique pour 1% des cascades à 50keV, mais cela n'a pas pu être confirmé expérimentalement (Zinkle and Singh, 2006), dont les observations MET situent ce seuil à moins de 0,1%. Nous rappelons ici que, du fait de sa structure cristalline moins compacte, l'efficacité des cascades dans le CC est très inférieure à celle observée dans les matériaux cubiques à faces centrées (CFC) (Kiritani, 1986, Kirk et al., 1987, Singh and Zinkle, 1993, Eldrup et al., 2002, English and Jenkins, 1987).

En ce qui concerne l'évolution d'amas de lacunes dans le fer, les résultats DM montrent qu'ils ne conduisent pas à la formation de boucles de dislocation, mais à des arrangements tridimensionnels à l'origine de nano-cavités (Bacon et al., 2003). Ceci est en accord avec des observations MET (English and Jenkins, 1987) et PAS (Eldrup and Singh, 2000).

La DM indique que les atomes interstitiels évoluent majoritairement vers la formation de boucles parfaites dans une configuration 1D, dite *crowdion*, dans laquelle n atomes se partagent $n-1$ sites du réseau selon la direction $\langle 111 \rangle$ (Stoller et al., 1997, Wirth et al., 1997, Bacon and Delarubia, 1994, Soneda and de la Rubia, 1998, Bacon et al., 2003).

Ces boucles étant très mobiles, les premières études avaient conclu qu'elles s'annihileraient très rapidement aux puits (Stoller et al., 1997, Wirth et al., 1997), ne jouant pas de véritable rôle dans la fragilisation de l'alliage. Cette conclusion va cependant à l'encontre des études MET menées depuis les années 60 dans les matériaux ferritiques, qui montrent qu'on observe des boucles interstitielles de type $a\langle 100 \rangle$ (a étant le paramètre de maille du réseau), avec une fraction minoritaire de $a/2\langle 111 \rangle$, pour des doses supérieures à 1 dpa (Masters, 1965, Eyre and Bartlett, 1965, 1973, Little et al., 1980, Horton and Farrell, 1984, Kawanishi et al., 1986, Ward and Fisher, 1989, Bullough et al., 1991, Nicol et al., 2001). A l'époque des premières observations (avant la DM), deux modèles furent proposés pour expliquer la formation des ces boucles de type $a\langle 100 \rangle$:

- B.C. Masters (Masters, 1965) postula la formation de boucles $a\langle 100 \rangle$ par interaction de petites boucles $a/2\langle 111 \rangle$, mais son travail fut abandonné provisoirement faute d'observation de ces dernières.
- Eyre et al. (Eyre and Bullough, 1965, Eyre and Bartlett, 1965, 1973, Eyre and Maher, 1971, 1977, Bullough et al., 1991) proposèrent un autre modèle basé sur le cisaillement des boucles $a/2\langle 110 \rangle$, qui seraient en même temps à l'origine des $a/2\langle 111 \rangle$ et $a\langle 100 \rangle$.

Plus récemment, les travaux DM ont permis de conforter les hypothèses de Masters en montrant :

- la stabilité des boucles $a/2\langle 111 \rangle$ (par rapport aux $a\langle 110 \rangle$) (Johnson, 1964, Wirth et al., 2000, Osetsky et al., 2000b), et leur formation au sein des cascades de déplacement (Bacon and Delarubia, 1994, Stoller, 1996, Soneda and de la Rubia, 1998).
- la stabilité (Osetsky et al., 2000b), formation et croissance de boucles $a\langle 100 \rangle$ à partir des $a/2\langle 111 \rangle$ (Marian et al., 2002a).

Marian et al. (2002a) s'appuient en outre sur deux arguments théoriques pour réfuter le modèle de Eyre et al. :

- Dans les matériaux CC, lors du cisaillement des $a\langle 110 \rangle$, les boucles $a/2\langle 111 \rangle$ sont énergétiquement plus stables que les boucles $a\langle 100 \rangle$.
- Les matériaux CC ayant une forte énergie de faute d'empilement, la formation des boucles fautées $a\langle 110 \rangle$, à la base du mécanisme de cisaillement, est très difficile.

Par ailleurs, Marian et al. (2002b) ont mené leurs calculs jusqu'à une taille qui permet l'analyse en « MET numérique » (*Computational TEM*, CTEM) par multicouches (Cowley and Moodie, 1957, Stadelmann, 1987) : les résultats montrent des images de boucles compatibles qualitativement avec les observations en MET citées plus haut.

Finalement, on notera que des travaux plus récents montrent qu'environ 15-30% des amas créés directement lors des cascades à 600 K ne sont pas du type glissile 1D *crowdion* $\langle 111 \rangle$, mais d'un autre type sessile et métastable sous forme d'arrangement 3D compact (Gao et al., 2000). Cependant, ceci n'a pas d'impact sur l'évolution de la microstructure à long terme (Bacon et al., 2003). En effet, lors des expériences de revenu DM des cascades ($t > 1$ ns) pour des températures entre 500 et 900 K, la majorité des amas sessiles se transformeraient rapidement en ceux plus communs et glissiles de type $\langle 111 \rangle$.

Pour la suite, nous retiendrons de la DM, d'une part la formation de cavités de taille nanométrique, et d'autre part la formation de boucles interstitielles $a\langle 110 \rangle$. Cependant, sans contredire l'utilité manifeste de cette technique pour l'amélioration de la connaissance des phénomènes à l'échelle atomique, il convient aussi de signaler ses limites. Ainsi, tout résultat DM dépend d'abord du potentiel interatomique choisi (voir discussion dans Chaussidon et al. 2006), mais aussi des conditions de la simulation comme la manière dont on fixe des conditions périodiques. Enfin, il est également nécessaire de garder à l'esprit qu'on peut difficilement trouver de validations expérimentales adaptées à des échelles de temps et d'espace aussi réduites.

A.2.1.2 Simulations cinétiques (« KMC »-« RT »)

Les techniques

Alors que la DM peut être utilisée pour déterminer la nature des défauts primaires formés durant l'irradiation, les échelles de temps accessibles par cette technique ne dépassent pas quelques nanosecondes. Une autre technique de modélisation doit être utilisée pour prédire l'évolution de cet endommagement sur des temps et des volumes permettant de relier l'échelle des simulations atomiques (DM) à celle des observations (MET, LEAP, PAS, *etc.*). C'est le rôle des simulations cinétiques de type Monte-Carlo (*Kinetic Monte Carlo*, KMC) (Soneda et al., 2003) ou les modèles de type *Rate Theory* (RT) (Kwon et al., 2007).

Dans l'étude de l'endommagement par irradiation, les méthodes KMC constituent une approche statistique où, à partir des probabilités d'un ensemble d'événements élémentaires aussi exhaustif que possible (diffusion d'espèces, dissociation de clusters, *etc.*), on simule l'évolution spatiale et temporelle des différentes espèces analysées. Le lien avec l'échelle inférieure se fait via la distribution originale d'espèces et les probabilités des événements, calculées à partir de leur barrière énergétique associée, que l'on obtient par DM ou *ab-initio*.

Résultats

Odette et al. (Odette and Wirth, 1997) ont utilisé un code LMC (*Lattice Monte Carlo*), dans lequel les espèces considérées sont les atomes individuels, pour étudier la formation et évolution d'amas complexes dans l'acier de cuve, allant jusqu'à la prédiction des précipités riches en cuivre ou manganèse mentionnés dans l'introduction.

Dans le cas des aciers faiblement alliés, on s'intéresse surtout aux défauts de la matrice. Ainsi, Soneda et al. (2003) ont étudié l'effet des paramètres d'irradiation (température, flux, spectre neutronique) et la taille de grains sur les amas lacunaires et interstitiels dans le fer. Leur modèle étant qualitativement validé par des observations PAS et MET pour des irradiations à 350 K (Eldrup et al., 2002) et 600 K (Victoria et al., 2000, Nicol et al., 2001) respectivement, ils montrent que :

- La croissance des amas lacunaires est favorisée à 600K par rapport à 350 K, car les petits amas de nouvelle formation sont instables et la mobilité des lacunes très élevée. De même, la croissance d'amas de SIA se voit limitée par l'excédent de lacunes libres.
- Le flux neutronique a un fort impact sur les populations de défauts à partir de 10^{-6} dpa/s et 10^{-8} dpa/s pour les lacunes et interstitiels respectivement : le nombre de défauts augmente de plus d'un ordre de grandeur, la taille moyenne des amas de SIA diminue, et celle des amas lacunaires augmente.
- L'annihilation des défauts mobiles est majoritaire le long des dislocations (un facteur 30 par rapport aux joints de grain), et l'effet de la taille des grains est faible et sature dès 10 μm .

En dehors des résultats concrets, le travail de Soneda et al. montre surtout l'importance de tenir compte des facteurs d'irradiation lors des extrapolations provenant des différentes études expérimentales. En prenant par exemple l'effet du flux, leur étude montre que l'endommagement subi par l'acier de cuve en fonctionnement ($\sim 10^{-12} - 10^{-10}$ dpa/s) pourrait être très différent (plus d'un ordre de grandeur de différence entre la densité en nombre à forte dose) de celui subi par les spécimens utilisés dans la plupart d'analyses MET (souvent réalisés à des flux d'endommagement proches de 10^{-4} dpa/s). La compréhension et l'estimation de cet effet de flux étant fondamentale à la correcte interprétation des expériences d'irradiation accélérées, son étude a fait l'objet d'un rapport complet des organismes de recherche de l'industrie électrique américaine (EPRI) et japonaise (CRIEPI), ainsi que d'autres études plus récentes, dont celui de Odette et al. (2005).

Le modèle de Soneda et al. permet également de soulever certaines faiblesses potentielles des techniques expérimentales. Citant l'exemple du PAS, le modèle ne prédit pas la saturation de la densité en nombre de défauts lacunaires à partir de $10^{-2} - 10^{-3}$ dpa observée expérimentalement. Pour Soneda, il s'agirait d'un artefact du PAS, résultant d'une densité de lacunes libres suffisamment élevée pour annihiler tous les positrons.

La réciproque n'est pas moins vraie, puisque des observations MET montrent des densités de boucles interstitielles inférieures aux prédictions, remettant en question les hypothèses concernant la mobilité des amas.

A l'heure actuelle, bien que ce type de modèle ait fait ses preuves pour des cas de figure relativement simples (Fu et al., 2005), il semblerait que les phénomènes étudiés ici ne soient pas encore totalement à leur portée. On notera cependant la poursuite des efforts permettant de reproduire ces chaînes d'événements de manière aussi représentative que possible, dont la mise au point d'un code de type *Object KMC*, développé conjointement entre EDF, Université Lille-I et SCK (Domain et al., 2004). Dans ce cas, à la différence des codes LMC, les espèces ne se limitent plus à un atome, mais à des « objets » plus complexes tels que des amas, des boucles de dislocation, etc.

Notons que la validité des résultats obtenus par ces méthodes dépend d'une part des incertitudes sur les probabilités des événements élémentaires obtenus en DM, et d'autre part sur l'exhaustivité des événements considérés.

A.2.1.3 *Précipitation*

Ayant restreint l'objet de notre étude aux aciers faiblement alliés, l'intérêt que nous portons à ce type de modèle est réduite. Nous nous contenterons de noter qu'en dehors des approches KMC et RT, des travaux sont menés afin d'établir des modèles analytiques pour prédire la précipitation des éléments d'alliages tels que le cuivre dans le fer- α (par exemple Barashev et al. (2004)).

A.2.2 Observations

De nombreuses techniques expérimentales sont utilisées pour analyser la nanostructure des matériaux irradiés. Intrinsèquement, chaque technique possède ses limitations, mais se montre aussi souvent complémentaire des autres.

- Jusqu'à l'échelle atomique on utilisera :
 - o le PAS / SANS pour obtenir des informations sur la population de lacunes (véhicules de la diffusion dans le métal, elles jouent un rôle essentiel dans la formation et l'évolution de l'endommagement) et les amas d'éléments d'alliages,
 - o le LEAP pour avoir une plus grande précision dans l'identification chimique de ces amas/précipités.
- Au-delà du nm on utilisera le MET, seule technique capable d'analyser les défauts de la matrice tels que les boucles de SIA.

Finalement, le revenu post-irradiation (*Post Irradiation Annealing*, PIA) est parfois utilisé en combinaison avec les techniques précédentes pour confirmer certaines hypothèses faites à la limite de leur précision. En effet, il se peut que la résolution d'un cliché de MET ne soit pas suffisante pour déterminer le caractère lacunaire ou interstitiel d'une boucle, mais on peut obtenir cette information en visualisant la réaction de la boucle durant une montée en température (si elle est lacunaire, elle disparaîtra).

A.2.2.1 *Diffraction de neutrons aux petits angles (« SANS »)*

Résultats

Des résultats en diffraction de neutrons aux petits angles (*Small Angle Neutron Scattering*, SANS) sur l'acier de cuve sont disponibles depuis peu (Bergner et al., 2008). Cette étude, menée au sein du programme Européen PERFECT, se caractérise par la combinaison des techniques SANS, PIA (recuit à 475°C pendant 100h, soit similaire à la pratique industrielle pour les cuves russes), et des mesures de dureté Vickers.

Deux matériaux modèles irradiés aux neutrons dans des conditions de réacteur (0,01dpa et 0,09 dpa, $4 \cdot 10^{-10}$ et $3 \cdot 10^{-9}$ dpa/s) et avec des teneurs différentes en Cu y sont étudiés.

Le Tableau A-1 reprend les principaux résultats obtenus à faible et forte dose.

Teneur en Cu de l'alliage	Nature des défauts	Densité (10^{17} cm^{-3})	Distribution de taille (nm)	
			Mode	Rayon Max
0,015%	Amas Fe-Cu-V	0,4 → 1,3 ↑	0,93 → 0,96 ↑	2,2 → 2,8 ↑
0,42%	Amas de Cu (0,15 V par site CC)	3,0 → 2,2 ↓	1,46 → 1,61 ↑	-

Tableau A-1 : Défauts d'irradiation observés par SANS dans des aciers de cuve à différentes teneurs en Cu [Bergner 2008]. On montre la nature des défauts, sa densité et distribution de taille (mode et rayon maximal) pour deux conditions d'irradiation différentes ($0,01 \text{ dpa}$ à $4 \cdot 10^{-10} \text{ dpa/s}$ et $0,09 \text{ dpa}$ à $3 \cdot 10^{-9} \text{ dpa/s}$).

On note par ailleurs que :

- le durcissement est plus élevé dans l'alliage à faible teneur de Cu (+85% vs. +48% après irradiation à 0,01 dpa). Ce constat conforte l'hypothèse selon laquelle les défauts de la matrice (que ce soit les complexes nano-cavité soluté observés ici ou d'autres), et non pas les précipités de Cu, sont les principaux responsables de la fragilisation par l'irradiation dans les aciers faiblement alliés.
- le rôle du traitement de revenu est inversé pour les deux alliages. Pour l'alliage à faible teneur en Cu on observe une dissolution des amas et une récupération complète des propriétés mécaniques. Pour l'alliage à plus haute teneur en Cu, on observe un grossissement des amas et un durcissement résiduel par rapport à l'état non-irradié. La nature des amas respectifs est détaillée dans le Tableau A-1. Ceci montre les meilleures performances de la nuance à basse teneur en Cu dans le cas d'un éventuel revenu de la cuve tel qu'il est pratiqué sur les centrales russes.

A.2.2.2 *Spectroscopie d'annihilation de positrons (« PAS »)*

La technique

Le principe de cette technique consiste à envoyer des positrons sur un matériau, puis analyser les photons gamma (spectroscopie) résultant de l'annihilation des paires électron-positron. Ainsi, à partir de différents types de mesures PAS on aura des informations sur les lacunes et les atomes impliqués (Saarinen, 2000) :

- Les mesures du temps de vie moyen des positrons, qui fournissent des informations sur les populations de lacunes (taille, distribution, affinité à d'autres espèces)
- Les mesures dites « CDB » (*Coincidence Doppler Broadening*) donnent la composante longitudinale du moment des paires électron-positron à partir du décalage Doppler observé dans les photons issus de leur annihilation. On obtient ainsi la distribution des quantités de mouvement (P_L) des électrons annihilés, que l'on subdivise en deux :
 - o une composante basse énergie (paramètre S), qui fournit des informations sur les couches de valence et les lacunes.
 - o une composante haute énergie (paramètre W), qui fournit des informations sur l'identité des atomes (électrons du noyau).
- La corrélation angulaire de la radiation d'annihilation (*Angular Correlation of Annihilation Radiation*, ACAR). Il s'agit essentiellement d'une transformée de Fourier de la fonction d'onde d'annihilation des positrons, qui permet de calculer P_L avec beaucoup plus de précision que le CDB et permet donc d'avoir des informations sur la structure cristallographique des objets étudiés. En contrepartie, le spectre de variation de P_L mesurable est réduit, ce qui limite la collecte d'informations concernant la nature chimique des atomes impliqués.

Ces trois types de mesures, nécessitant des instruments différents, sont complémentaires et apportent une description plus complète des défauts détectés (Hasegawa and Nagai, 2008).

Notons finalement que, du fait des fortes énergies des positrons utilisés, cette technique n'est pas utilisable sur des échantillons irradiés aux ions, pour lesquels les profondeurs d'endommagement sont de l'ordre du micron. Le développement de la technique du PAS pulsé devrait permettre de s'affranchir de cette limitation (Mileshina and Nordlund, 2007).

Résultats.

Nécessitant la mise en œuvre d'irradiation aux neutrons, ces résultats sont moins courants que ceux d'autres techniques, comme le MET. Dans le cas d'irradiations à ~300°C sur des matériaux plus ou moins représentatifs de l'acier de cuve, on dispose de ceux issus d'une collaboration entre le SCK-CEN et l'Université de Tohoku (Japon), à l'occasion du programme Européen PERFECT (Lambrecht and Almazouzi, 2007a).

Le Tableau A-2 détaille l'essentiel des résultats de cette étude en PAS (complétée par du PIA) pour des matériaux irradiés aux neutrons entre 0,025 et 0,2 dpa (pas d'informations sur le flux) au réacteur de recherche BR2 (SCK-CEN). On observe notamment que l'ajout d'éléments d'alliage ralentit fortement la cinétique de croissance des défauts d'irradiation tout en multipliant leur nombre (que ce soit des amas lacunaires ou de précipités de Cu), ce qui pourrait s'expliquer par un piégeage des lacunes dans ces éléments.

Alliage	Observations PAS
Fe pur	Des amas de lacunes croissent jusqu'à former des nano-cavités
Fe - C	Le carbone aide à la nucléation d'amas de lacunes, ce qui conduit à une densité accrue d'amas de plus petite taille.
Fe - C - Cu	L'ajout de Cu se traduit, comme pour le C, par la formation de nano-cavités plus nombreuses et plus petites, ainsi que l'apparition d'amas Cu-lacune
Fe – Ni – Mn (Cu)	Le Mn n'a que très peu d'affinité pour les positrons, et il n'est pas visible en PAS. On constate cependant la présence d'amas de Ni sur des zones appauvries en lacunes, et une diminution globale de la taille des défauts. Par ailleurs, il semblerait que le Ni et le Mn ralentissent significativement la cinétique de précipitation du Cu.
Acier de cuve bas Cu	On retrouve un comportement similaire aux alliages modèles sans Cu.

Tableau A-2 : Observation des défauts d'irradiation dans les alliages ferritiques par PAS (Lambrech et Almazouzi, 2007a).

Par ailleurs, des études réalisées après des irradiations de Fe- α à température ambiante (Eldrup et al., 2002, Zinkle and Singh, 2006) ont montré que :

- les densités d'amas mesurées (entre 10^{24} et 5.10^{24}m^{-3} pour des doses entre 10^{-4} et 0,23 dpa) peuvent être jusqu'à deux ordres de grandeur plus élevées que celles observées en MET, dont les mesures ne constituent donc que des seuils inférieurs.
- les densités d'amas mesurées ne représentent que 4% de l'endommagement total (dpa) prévu par les codes de calcul, ce qui indique que la recombinaison lors des cascades de déplacement est très importante même à 314 K.

On notera aussi qu'une étude sur de l'acier de cuve coréen à faible teneur en cuivre (0,03%) et irradié à 523 K à fort flux, conclut que la majorité des défauts d'irradiation générés dans ces conditions se présente sous forme de lacunes isolées (Kwon et al., 2007).

A.2.2.3 Sonde atomique à électrode locale (« LEAP »)

La technique

Les techniques de sonde atomique tomographique (*Tomographic Atom Probe*, TAP) permettent d'évaporer un matériau couche atomique par couche atomique en relevant la nature des atomes et leur position dans l'espace (en 2D ou 3D selon le modèle). Il existe par ailleurs plusieurs types de TAP, ce nom étant utilisé en général pour la première génération d'appareils. Depuis, plusieurs améliorations ont vu le jour. Elles ont pour but d'améliorer la résolution chimique (*Energy Compensated Atom Probe*, ECAP), la vitesse d'acquisition et/ou la taille des échantillons (*Local Electrode Atom Probe*, LEAP), voir de combiner ces deux techniques (EC-LEAP).

Résultats

La LEAP est souvent utilisée pour valider les mesures de PAS de par sa meilleure précision concernant la composition chimique (Lambrech et Almazouzi, 2007b). Grâce à l'information spatiale, elle permet également d'étudier des effets comme la ségrégation aux joints de grains, ainsi que l'analyse d'atomes tels que le Mn pour lesquels les positrons ne possèdent pas d'affinité.

Certains résultats de Hasegawa et Nagai (2008) sur des matériaux similaires à ceux de l'étude PERFECT mentionnée ci-dessus (et fournis par SCK-CEN), apportent des éléments d'information complémentaires sur :

- Les précipités dans l'acier de cuve à faible teneur en Cu, dont :
 - o la majorité sont à base de Mn, Si, Ni, mais leur nombre et taille sont insuffisants pour expliquer le durcissement constaté expérimentalement.
 - o ceux de Mn et Ni sont associés au Cu, qui semble nécessaire à leur nucléation.
 - o seul le P, bien qu'en très petite quantité, semble pouvoir précipiter de manière isolée. Parfois associé aussi Cu, il pourrait être un site de nucléation pour ce dernier.
- La ségrégation d'espèces, qui est très forte tant à l'intérieur des carbures (P aux interfaces, Si, et Cr) qu'aux joints de grain (P, C et Mo après 3 ans, puis Si et Mn après 20 ans).
- Le rôle du Mn dans un alliage base Fe- α :
 - o L'ajout de Mn conduit à un durcissement considérable, sans formation de précipités. Par ailleurs des résultats PAS sur cet alliage ne montrent pas de population significative d'amas de lacunes.
 - o L'utilisation combinée des modèles de durcissement par précipités tel que celui de (Russell and Brown, 1972) avec le modèle d'Orowan pour les boucles de dislocations, prédit un durcissement similaire à celui observé dans la nuance sans Mn, mais encore loin de celui mesuré dans le matériau avec Mn.

Ces résultats laissent entrevoir une sorte de troisième voie pour expliquer le durcissement par irradiation observé dans les aciers de cuve. Ainsi, entre la vision privilégiée aux États-Unis (basée sur les précipités), et celle privilégiée en Europe (autour de l'endommagement de la matrice), les travaux de Nagai (2008) semblent indiquer que les éléments d'alliage comme le Mn pourraient jouer un rôle important, non pas en précipitant, mais en renforçant et stabilisant les défauts de la matrice tels que les boucles de dislocation.

A.2.2.4 Microscope électronique à transmission (MET)

La technique

Comme on l'a vu précédemment, plusieurs études identifient l'endommagement de la matrice comme la source principale de la dégradation des propriétés des aciers ferritiques. Or le MET est la seule technique qui permette l'observation directe de défauts tels que les boucles de dislocations, ainsi que l'identification de leur nature exacte (vecteur de Burgers, plan de glissement).

Bien que les premières observations en MET sur le Fe- α datent de 1962 (Eyre, 1962a, Eyre, 1962b), Zinkle et Matsukawa (2004) prônent la supériorité des conditions d'observations de type *weak-beam* développées par Kiritani et al. dans les années 80 (Kiritani et al., 1984, 1986, 1986, Yoshida et al., 1985). Ils soulèvent aussi la nécessité d'élaborer des lames extrêmement minces (~ 100 nm) pour pouvoir identifier des défauts de quelques nanomètres (Ruhle and Crump, 1970, Zinkle, 1987), et les risques de sous-estimation de leur densité qui y sont associés. En effet, dans une lame épaisse les plus petits défauts (plus nombreux) ne sont pas visibles, tandis que les lames très minces favorisent l'élimination des grands et petits amas aux surfaces libres.

L'inconvénient principal de cette technique dans l'étude de la nanostructure vient toutefois de son manque de résolution, limitée dans les meilleurs cas au nm. En effet, d'autres techniques (PAS, *etc.*) montrent que, pour les doses typiquement subies par les aciers de cuve, la majorité de la nanostructure d'irradiation est de taille sub-nanométrique (Eldrup et al., 2002, Zinkle and Singh, 2006). Ainsi, dans la plupart des cas (et surtout pour les aciers alliés) on se voit

obligé d'étudier par MET des matériaux irradiés à des doses et températures très éloignées de celles des réacteurs en fonctionnement. En dehors des difficultés inhérentes à la technique elle-même, il faut rajouter le choix éventuel d'irradier les lames aux ions à des flux très élevés pour des raisons d'ordre pratique. Comme nous l'avons vu dans les modèles KMC, bien que ces irradiations puissent être équivalentes en termes de dose, elles peuvent être sujettes à des effets de flux importants. Il faudra donc faire très attention à la façon d'extrapoler ces résultats dans le domaine d'intérêt.

Le MET reste néanmoins un outil indispensable pour étudier, à l'échelle des dislocations, les modes de déformation du matériau.

Résultats

Par le passé, des observations sur des matériaux ferritiques irradiés par électrons (Yoshida et al., 1975), neutrons (Little et al., 1980), et ions (Masters, 1965), ont montré la présence de boucles de SIA, le plus souvent avec un vecteur de Burgers de type $a\langle 100 \rangle$. Dans les autres alliages CC, seuls les boucles de type $a/2\langle 111 \rangle$ ont été identifiées (Sikka and Moteff, 1973).

Le Tableau A-4 regroupe les résultats quantitatifs d'études récentes sur ces matériaux, que nous résumons qualitativement ci-dessus :

- Dans les alliages ferritiques irradiés aux doses et températures en conditions des « réacteurs » on n'observe pas d'endommagement en MET.
- La taille des défauts observés pour les nuances plus alliées est inférieure à celles des nuances moins alliées pour des conditions d'irradiation équivalentes.
- La majorité des boucles observées sont interstitielles, avec des vecteurs de Burgers de type $a\langle 100 \rangle$. On observe aussi des populations plus faibles de boucles de type $a/2\langle 111 \rangle$.

Par ailleurs, voici quelques observations additionnelles fournies par ces études :

- Fujii et al.(2005) ont observé des boucles plus grandes à proximité des joints de grain.
- H. Mayoral et al.(2006) ont observé des cavités nanométriques dans le Fe pur.
- Meslin et al. (2007) ont étudié l'impact de température, dose, et teneur en C sur la densité et taille des boucles. Leur évolution est décrite qualitativement dans le Tableau A-3 (les valeurs du Tableau A-4 ne correspondent qu'à la température et dose entre parenthèses). Ils ont par ailleurs constaté une dissymétrie dans le nombre de familles de vecteurs de Burgers selon l'orientation cristalline des grains :
 - o (100) : majoritairement $b = a\langle 100 \rangle$ et $a\langle 001 \rangle$, avec un peu de $a\langle 010 \rangle$.
 - o (111) : les trois familles sont présentes en même nombre.
- Ceci n'étant prédit par aucun des modèles disponibles (voir partie sur la DM), ils estiment qu'il s'agit d'un effet de bords.

		Diamètre	Densité
Température	↑↑	↑↑	↓↓
Teneur en C	↑↑	↓↓	↑↑
Dose	↑↑	↑↑	↑↑

Tableau A-3 : Schéma de principe illustrant l'effet de la température, la teneur en carbone (C) et la dose, sur les boucles SIA observées au MET dans le Fe- α (Meslin et al., 2007)

	Matériau	Irradiation				Défauts			
		Type	Dose	Flux	Temp.	Nature	Densité	D moy/max	Vecteurs de Burgers
Victoria et al. (2000)	Fe	n	0,008	4.10 ⁻⁸	320	Boucles nd.	0,01	-	-
			0,08				0,05	-	
			0,38				0,4	5,1 / 16	
Nicol et al. (2001)	Deux nuances de Fe ~ pur	n	0,06	-	280	Boucles SIA	0,085 0,066	4,2 ± 0,3 4,5 ± 0,3	a<100> (80%) a/2<111> (20%)
Farrell et al. (2003)	A533B	n	0 → 0,1	-	65 - 100	-	-	-	-
			0,89	-		Blackspot	0,65	1,3	
Hashimoto et al. (2004)	Va	n	0,012	-	65 - 100	Boucles nd.	1,1	1,8	-
			0,12	-			1,9	2,1	
			0,69	-			2,3	2,1	
Fujii et Fukuya (2005)	A533B	Ni ²⁺	1	10 ⁻⁴	290	Boucles SIA	0,1	2,5 / 6	a <100>
Zinkle et Singh (2006)	Fe	n	0 → 0,001	7.10 ⁻⁷	50 - 70	-	-	-	a/2 <111> [111] (80%) a/2 <111> [110] (20%) a <001> (<1%)
			0,001→0,8			Boucles SIA	0,01→6	1 → 4 / 1,5 → 8	
Hernandez Mayoral et al. (2006)	UHP-Fe	Fe ²⁺	0,1	2.10 ⁻⁴	300	Boucles nd.	7.10 ¹⁴ m ⁻²	5 / 12	a<100>
			0,5			Boucles SIA	7.10 ¹⁴ m ⁻²	10 / 25	Surtout a/2 <11-1>, quelques a<001>
			1				2.10 ¹⁴ m ⁻²	13 / 30	Surtout a/2 <11-1>, très peu a<001>
Meslin et al. (2007)	UHP-Fe Fe, FeCu	Kr ²⁺	0,2 → 2 (0,5)	1,5 10 ⁻⁴	200→400 (300°C)	Boucles SIA (prismat)	0,07	12 / -	a<100>
	Complex						-	-	Surtout a<100>, mais aussi quelques <111>

Tableau A-4 : Comparaison des différentes études MET récentes (2000-2007) sur les défauts d'irradiation dans les alliages ferritiques et le Fe-α. On précise les conditions d'irradiation neutronique (n), ou ionique (Ni²⁺, Fe²⁺ et Kr²⁺), ainsi que les caractéristiques des défauts observées. Pour plus de détails voir plus haut dans le texte.

Unités

- Dose (dpa)
- Flux (dpa/s)
- Temp (°C)
- Densité 10²³ m⁻³
- D moyen/max (nm)

A.2.3 Discussion

Les résultats obtenus par différentes techniques de simulation et d'analyse expérimentale, mises en œuvre pour identifier la nature de l'endommagement par irradiation dans l'acier de cuve, et les matériaux ferritiques en général, ont été passés en revue. Cependant, compte tenu des incertitudes entourant une grande partie des cas, nous ne nous aviserons pas de conclure définitivement quant à la nature de la nanostructure d'irradiation à l'origine de la fragilisation de ces matériaux. Des progrès restent à faire dans toutes ces disciplines afin d'améliorer la connaissance de ce phénomène.

Nous pouvons néanmoins répondre à quelques questions qui nous semblent pertinentes pour un acier de cuve dans les conditions d'irradiation en réacteur :

- La fragilisation provient-elle des précipités ou des défauts de matrice ?
 - o Pour les aciers ferritiques à faible teneur en Cu (y compris le 16MND5), la précipitation d'éléments d'alliage ne semble pas jouer un rôle important. Le durcissement observé macroscopiquement proviendrait des défauts de la matrice tels que des boucles de SIA ou des nano-cavités, potentiellement renforcées par d'éléments d'alliage tels que le Mn. Ceci est appuyé par des mesures des propriétés mécaniques en combinaison avec des observations de PAS, SANS, LEAP.
- Quel type de défauts de matrice ?
 - o Des amas 3D de lacunes, dont la formation lors des cascades de déplacement est prédite par la DM. Bien que jugés instables dans le fer par des simulations KMC (Soneda et al., 2003), elles pourraient être stabilisées par les éléments d'alliage. Certains résultats de SANS/PAS semblent indiquer la présence de cavités nanométriques, bien qu'elles s'avèrent difficilement détectables en MET.
 - o Des boucles de SIA de vecteur de Burgers $\frac{1}{2}\langle 111 \rangle$ ou $\langle 100 \rangle$. Disposant d'un modèle reliant de manière satisfaisante la production d'amas lors des cascades prédites par la DM au type de boucles observé en MET (Marian et al., 2002a), leur présence semble acquise. Les calculs KMC renforcent ce point et montrent qu'on a besoin de les introduire dans les modèles à l'échelle macroscopique pour tenir compte du durcissement. Cependant, il reste à établir l'extrapolation des populations observées en MET aux matériaux et aux conditions d'irradiation réelles.
- Quel rôle pour les interfaces microstructurales ?
 - o Souvent négligés dans la discussion, les joints de grain (latte pour la bainite) semblent jouer un rôle dans la distribution des défauts. Ainsi, bien que les simulations KMC leur prédisent un rôle minime dans l'annihilation des lacunes (Soneda et al., 2003), les résultats de LEAP montrent une importante ségrégation d'éléments d'alliage aux joints de grain (Hasegawa and Nagai, 2008). Par ailleurs, des études en MET indiquent une possible croissance privilégiée des boucles de SIA à leur proximité (Fujii and Fukuya, 2005).

A.3 Interactions défauts/dislocation

La partie précédente était consacrée à la description des objets nanométriques induits par l'irradiation. Cependant, pour introduire ces défauts dans des simulations de dynamique des dislocations (DD), il faut non seulement connaître leur type, taille ou distribution, mais aussi la façon avec laquelle ils interagissent individuellement avec les dislocations. Compte tenu de la taille des défauts, ces interactions devraient être calculées par dynamique ou statique moléculaire (DM, SM).

Ce type de simulation se caractérise par (Bacon et al., 2003) :

- des cellules cubiques (de quelques dizaines de nm d'arête) comprenant quelques millions d'atomes, nécessaires pour décrire une dislocation et un obstacle, avec des conditions périodiques dans la direction de glissement et des conditions périodiques ou surfaces libres dans la direction de la ligne de dislocation,
- des temps simulés de l'ordre de la nanoseconde avec des pas de calcul de l'ordre de la femtoseconde pour des vitesses de dislocations de l'ordre de la dizaine de m/s.
- des obstacles nanométriques en forme de cavités ou de boucles d'environ 100 SIA.
- En SM ($T = 0$ K) : chargement quasi-statique par incréments de $\sim 10^{-5}$.
- Pour les effets dynamiques (DM : $T \neq 0$ K) on applique une contrainte aux atomes en périphérie afin d'obtenir une vitesse de déformation entre 10^6 et 10^8 s $^{-1}$.
- La contrainte critique pour que la dislocation échappe au défaut (τ_c) se calcule comme la différence entre la contrainte maximale appliquée pour le franchir et celle obtenue dans le mouvement de la dislocation pour la même simulation sans obstacle.

Deux potentiels interatomiques sont utilisés dans les travaux détaillés par la suite :

- Le potentiel de type Finnis-Sinclair (1984) [aussi appelés potentiels EMB (*Empirical Many-Body*)] développé par Ackland et al. (1997), noté A97 par la suite.
- Le potentiel d'Ackland et al. (2004) ajusté sur des résultats *ab-initio*, noté A04.

Face à sa première version, l'avantage du deuxième potentiel d'Ackland et al, est de prédire:

- une structure compacte du cœur de la dislocation vis (Domain and Monnet, 2005, Chaussidon et al., 2006), en accord avec les calculs *ab-initio* (Frederiksen and Jacobsen, 2003),
- un glissement dans les plans $\{110\}$, en accord avec l'expérience (Spitzig and Keh, 1970a).

Ces différences, essentielles pour décrire la mobilité des dislocations vis ainsi que certaines propriétés des boucles de SIA, ne semblent pas avoir d'effet important pour les simulations de dislocations coins décrites par la suite (Terentyev et al., 2008b).

Notons finalement que, comme dans le fer CFC (Nogaret et al., 2007), les interactions dépendent du caractère vis ou coin des dislocations, dont nous faisons la distinction.

A.3.1 Dislocations coin

Dans cette partie, nous détaillons les résultats des simulations MD sur l'interaction entre une dislocation coin et les diverses obstacles induits par l'irradiation dans le fer- α [§A.2]: nanocavités et boucles de SIA de vecteurs de Burgers $\frac{1}{2}\langle 111 \rangle$ et $\langle 100 \rangle$.

A.3.1.1 Cas des nanocavités

Les résultats de la Fig. A-1 concernent des cavités sphériques de diamètre D , espacées d'une distance L les unes par rapport aux autres (Osetsky and Bacon, 2003, Osetsky et al., 2003a). Ces simulations ont été plus récemment revues par Terentyev et al. (2008a) en utilisant nouveau potentiel d'Ackland et al., mais les résultats restent très similaires.

Ces simulations DM montrent que :

- Les dislocations sont tout d'abord attirées par les cavités, puis, y pénètrent (chute de la contrainte), les cisailent en laissant une marche, et se libèrent à partir d'une contrainte critique (τ_c) donnée.
- Jusqu'à $D = 2\text{nm}$, les mesures de τ_c sont en accord avec les prédictions d'un modèle continu à obstacles impénétrables (Scattergood and Bacon, 1982) [Fig. A-1a] :
 - $\tau_c = \frac{Gb}{2\pi L} \left[\ln(D^{-1} + L^{-1})^{-1} + \Delta \right]$; G : module de cisaillement (A.1)
 - La valeur de D est 1,52 pour les cavités ou 0,77 pour des obstacles impénétrables contournés par le mécanisme d'Orowan (Bacon et al., 1973).
- Pour $D < 2\text{nm}$ le τ_c mesuré est inférieur à celui prédit par le modèle continu [Fig. A-1a], car ces obstacles sont faibles (pas de formation de dipôles).
- La température engendre un effet d'adoucissement [Fig. A-1b].
- En cisailant les cavités, les dislocations coin subissent le phénomène de montée par absorption de lacunes, ce qui diminue la taille de la cavité cisailée et donc, la force d'obstacle résiduelle (Osetsky et al., 2003a).

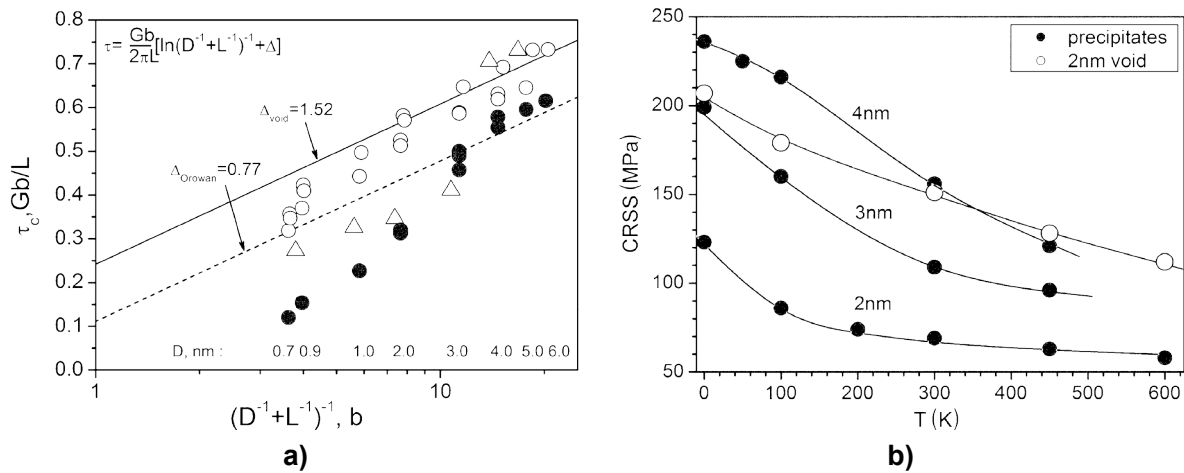


Fig. A-1 : Analyse DM de la contrainte de franchissement de défauts d'irradiation par des dislocations coin dans le CC (Bacon and Osetsky, 2007). **a)** Comparaison entre les résultats DM (cercles vides : cavités dans le Fe ; cercles noirs : précipités de Cu dans le Fe ; triangles vides : cavités dans le Cu) et les prédictions d'un modèle de durcissement continu (Scattergood and Bacon, 1982) ; **b)** Effet de la température sur le durcissement des vides de $D = 2\text{ nm}$ et des précipités de Cu dans le Fe.

On notera ici que ces résultats ont été utilisés comme entrée d'un code de dynamique de dislocations par Queyreau (2008) lors des travaux de thèse où il compare aussi le durcissement constaté en DD par rapport au modèle de Scattergood and Bacon (1982).

A.3.1.2 Cas des boucles de dislocation

Boucles avec $b = \frac{1}{2}\langle 111 \rangle$

De manière générale, les interactions dislocation-boucle sont différentes selon la nature de la boucle-obstacle (fautee, parfaite, interstitielle ou lacunaire). Pour les simulations avec boucles de vecteur de Burgers du type $\frac{1}{2}\langle 111 \rangle$, on distingue deux cas principaux selon que celui-ci soit parallèle au plan de glissement de la dislocation ou pas.

Les boucles de SIA parfaites avec un vecteur de Burgers parallèle au plan de glissement mais pas contenues dans celui-ci, peuvent être poussées ou entraînées par le champ de contrainte de la dislocation (Rong et al., 2005a). Ceci se traduit par une augmentation du coefficient de viscosité apparente de la dislocation (B) en fonction de la contrainte, la température, la taille et l'espacement des boucles, de même que la distance au plan de glissement. Le modèle de Rong et al. (2005a) établit ainsi une contribution B_{boucle} à partir de la diffusivité des boucles observée en DM (Osetsky et al., 2003b), et permet de prédire la vitesse et contrainte

nécessaires à la dislocation pour s'échapper d'une boucle. Ils notent par ailleurs que, bien que l'effet sur B soit limité, ce mécanisme peut être significatif dans la mesure où une dislocation décorée par des boucles augmente son rayon d'interaction avec les autres défauts.

Les boucles de SIA avec $\mathbf{b} = \frac{1}{2}[1\bar{1}1]$ coupant le plan de glissement (1-10) sont toutes attirées par la dislocation, mais réagissent de manière différente selon leur taille (Bacon et al., 2006) :

- Les petites boucles tournent pour retrouver le vecteur de Burgers de la dislocation ($\frac{1}{2}[111]$). Cela conduit à l'annihilation des segments impliqués dans la réaction, laissant un double super-cran. La ligne n'avance que lorsque les crans deviennent glissiles à τ_c en créant des lacunes.
- Les grandes boucles ne peuvent pas changer de vecteur de Burgers du fait de leur taille, mais se transforment selon une réaction du type $\frac{1}{2}\langle 111 \rangle + \frac{1}{2}\langle 1\bar{1}1 \rangle = \langle 100 \rangle$, favorable énergétiquement selon la règle de Frank pour le changement de l'énergie de la dislocation avec b^2 . Ces segments n'étant pas glissiles sur (1-10), ils se comportent donc comme des obstacles [Fig. A-2]. En augmentant la contrainte, des parties vis apparaissent, puis dévient vers leur plan de glissement inférieur (101). Le double super-cran crée devient glissile à τ_c .

Le mécanisme de franchissement est donc très différent la taille des boucles, avec des valeurs des valeurs de τ_c pour les grandes boucles très supérieures à ceux pour les petites boucles [Tableau A-5]. De ce fait, le durcissement associé aux petites boucles (1nm) est inférieur à celui des cavités de même dimension, mais l'inverse se vérifie pour les grandes (2 nm).

Il est aussi important de noter que les mécanismes décrits fournissent un moyen de nettoyer ce type de défauts.

	0 K	100 K	450 K
τ_c petites boucles (Mpa)	51	-	13
τ_c grandes boucles (Mpa)	-	250	160

Tableau A-5 : contrainte critique pour le désencrage des dislocations à l'encontre des boucles de dislocation

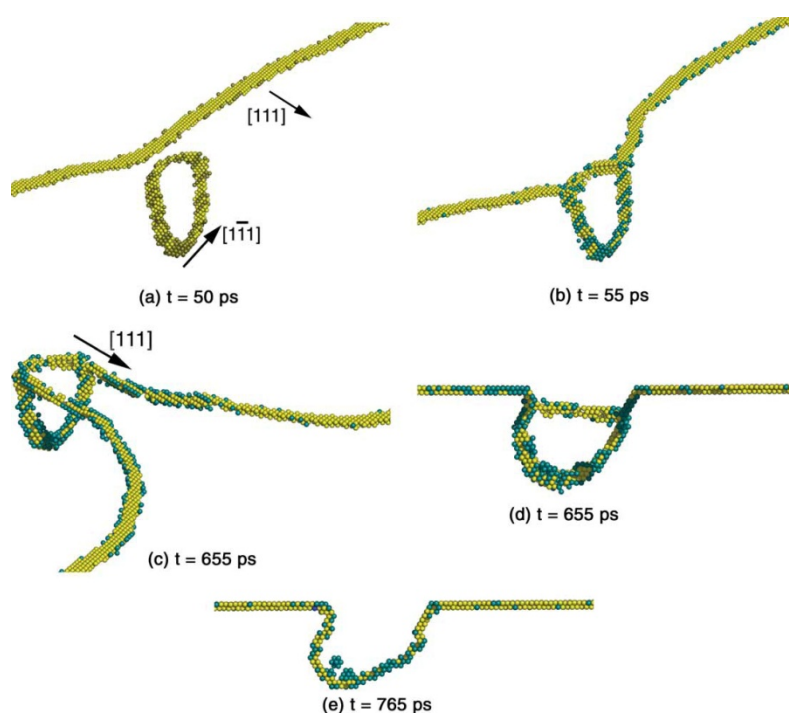


Fig. A-2 : Visualisation du glissement spontané et la transformation d'une boucle 331-SIA dans le Fer à 300 K. Un segment [010] s'est formé à (b), puis glisse au fur et à mesure que les bras coin glissent vers le bas à (c) et (d) (Bacon et al., 2006).

Boucles avec $b = \langle 100 \rangle$

Terentyev et al. (2008b) ont analysé ce type de boucles d'environ 160SIA ($D=2,6\text{nm}$), en prenant compte les trois orientations du vecteur de Burgers possibles, chacune avec les deux orientations possibles pour ses parties latérales ($\langle 001 \rangle$ ou $\langle 011 \rangle$), pour des positions différentes par rapport au plan de glissement de la dislocation. La température des essais fût de 300K et la vitesse de déformation de 10^7 s^{-1} , soit similaire à celle utilisée lorsqu'ils ont analysé l'interaction avec des cavités sphériques (Terentyev et al., 2008a).

Contrairement au cas précédant, avec les boucles de $b=\langle 100 \rangle$ un grand nombre de réactions complexes peut avoir lieu en fonction de l'orientation de la boucle et de ses côtés. Pour la boucle obstacle, ces interactions peuvent s'achever de quatre formes différentes :

- Elle reste inchangée après le passage de la dislocation [Fig. A-3a].
- Elle est transformée dans une boucle de $b = \frac{1}{2}\langle 111 \rangle$, puis absorbée en laissant un super-cran sur la ligne [Fig. A-3b], ou laissée derrière [Fig. A-3c].
- Elle est transformée dans un complexe sessile stable [Fig. A-3d], formé par deux boucles de vecteurs de Burgers différents jointes par un segment de $b = \frac{1}{2}[111]$

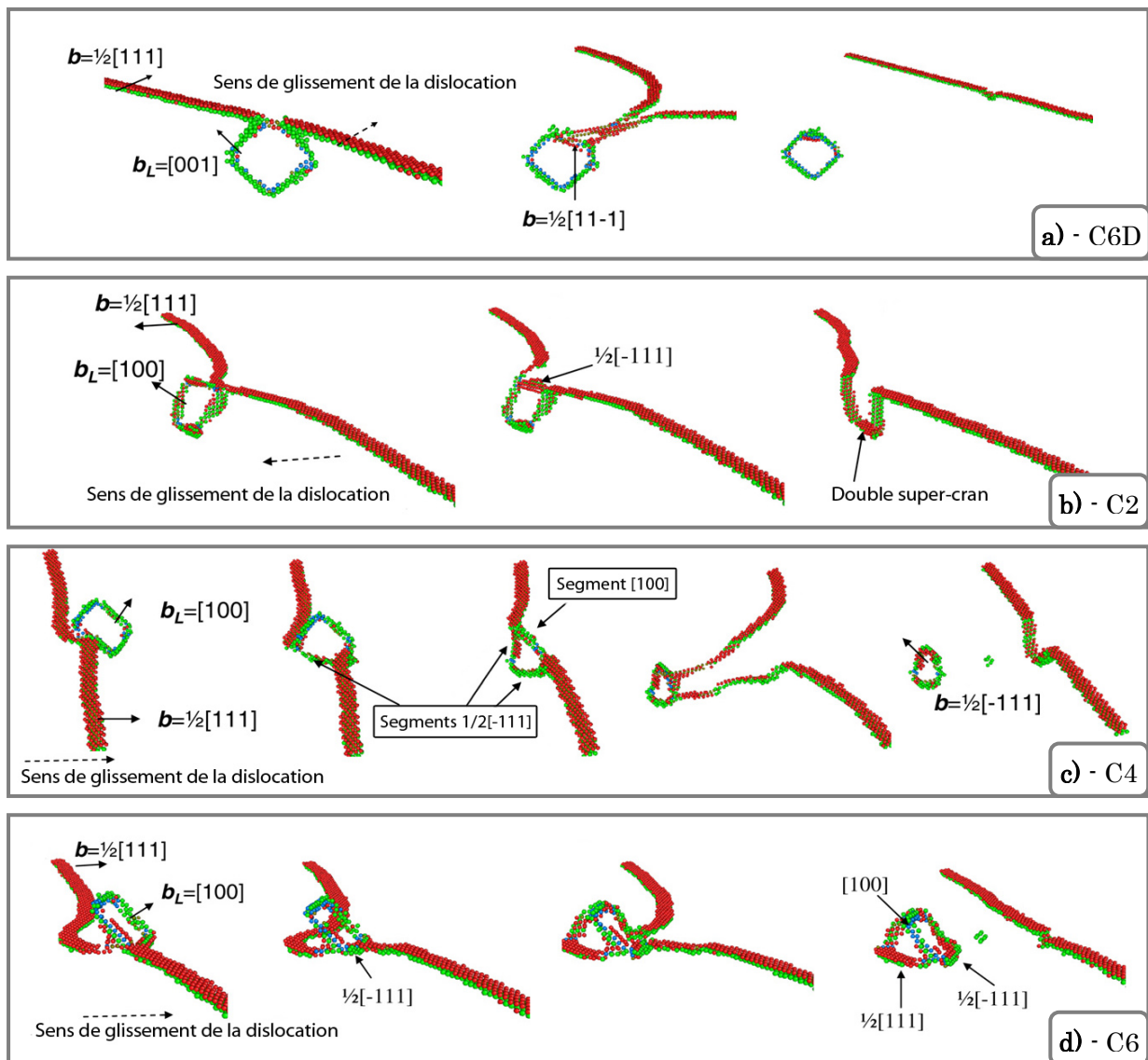


Fig. A-3 : Types d'interactions possibles entre une dislocation coin dans le fer CC et une boucle de SIA de vecteur de Burgers $b = \frac{1}{2}\langle 100 \rangle$ observées en DM (Terentyev et al., 2008b) en utilisant le potentiel d'Ackland et al. (2004). Les codes de chaque figure se correspondent à ceux utilisés par Terentyev et al. pour identifier les différents cas de figure.

Pour la majorité des cas traités il n'y a pas de différence appréciable entre les deux potentiels interatomiques étudiés (Ackland et al., 1997, 2004), ni au niveau des mécanismes observés ni au niveau des contraintes critiques. Une exception notable est précisément la configuration de la [Fig. A-3c], où le potentiel de 1997 prédit l'absorption complète de la boucle avec une contrainte critique très faible (~40 MPa) par rapport à la valeur obtenue avec le potentiel de 2004 (~190 MPa).

Le Tableau A-6 réunit l'ensemble des configurations étudiées, ainsi que les principaux résultats obtenus avec le potentiel A04 pour chacune d'entre elles. De manière générale on observe que :

- les boucles avec $\mathbf{b}=[001]$ sont les plus forts obstacles, indépendamment de la direction des bras latéraux.
- Parmi les boucles avec $\mathbf{b}=[100]$ ou $[010]$ ceux avec les bras selon $\langle 100 \rangle$ sont relativement forts, tandis que ceux avec les bras selon $\langle 110 \rangle$ sont les plus faibles.

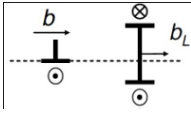
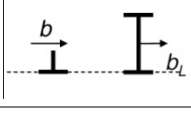
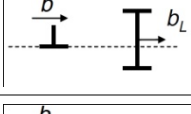
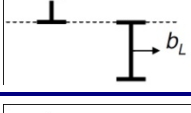
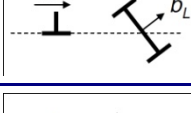
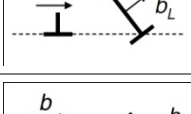
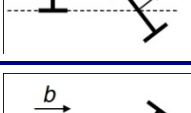
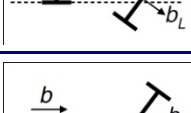
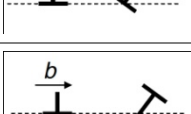
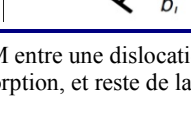
$\mathbf{b}_L$	Côtés	Géométrie	τ_c (MPa)	absorbé	Reste	Code
[001]	[110],[1-11]		200	75%	Boucle transformée $\mathbf{b} = \frac{1}{2}[-111]$	C1
	[100],[010]		100	5%	Boucle inchangée $\mathbf{b} = [001]$	C6U
			175	25%	Complexe sessile + super-cran $\frac{1}{2}[111]$	C6
			190	5%	Boucle inchangée $\mathbf{b} = [001]$	C6D
[100]	[01-1],[011]		40	100%	super-cran $\frac{1}{2}[111]$	C2
	[001],[010]		110	0%	Boucle inchangée $\mathbf{b} = [100]$	C4U
			190	50%	Boucle transformée $\mathbf{b} = \frac{1}{2}[-111]$	C4
[010]	[101],[10-1]		40	100%	super-cran $\frac{1}{2}[111]$	C3
	[100],[001]		160	10%	Boucle inchangée $\mathbf{b} = [010]$	C5U
			125	100%	super-cran $\frac{1}{2}[111]$	C5

Tableau A-6 : Interaction en DM entre une dislocation coin et une boucle de SIA avec $\mathbf{b} = \langle 100 \rangle$ dans le fer CC : mécanisme, contrainte critique, niveau d'absorption, et reste de la réaction (Terentyev et al., 2008b). (ref : codes utilisés par Terentyev et al.)

A.3.1.3 Comparaison entre les différents obstacles

Nous avons vu qu'alors que les cavités sont simplement cisailées (avec ou sans absorption partielle), les boucles de dislocation donne lieu à des réactions plus complexes, surtout lorsque leur vecteur de Burgers est du type $\mathbf{b}=\langle 100 \rangle$. La description de ces mécanismes est présentée dans le paragraphe précédent, dont les détails peuvent se trouver dans les publications correspondantes.

En vue de l'utilisation de ces résultats dans le code de dynamique de dislocations Tridis CC, il convient toutefois de comparer les différentes forces d'ancrage que représente chacun des obstacles. Ceci est fait dans la Fig. A-4, qui rassemble pour les mêmes conditions ($T = 300\text{K}$, $\dot{\epsilon} = 10^7\text{s}^{-1}$, potentiel A04) les contraintes critiques de franchissement pour les nanocavités (Terentyev et al., 2008a), les boucles avec $\mathbf{b}=\langle 100 \rangle$ (Terentyev et al., 2008b), et celles avec $\mathbf{b}=\frac{1}{2}\langle 111 \rangle$ (Terentyev et al., 2007).

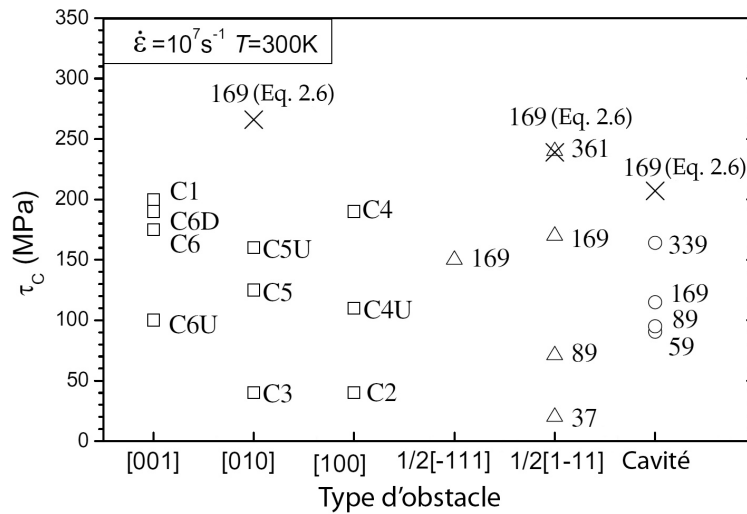


Fig. A-4 : Comparaison entre la force d'ancrage obtenue en DM par Terentyev et al. (2008b) pour une dislocation coin dans le fer CC traversant différents obstacles (boucles avec $\mathbf{b}=\langle 100 \rangle$, avec $\mathbf{b}=\frac{1}{2}\langle 111 \rangle$ et cavités nanométriques). Les points en croix ont été calculés à partir de l'équation (A.1).

De manière générale, on constate que :

- Les boucles avec $\mathbf{b}=\langle 100 \rangle$ (soit parallèle au plan de glissement de la dislocation) sont les plus résistantes, suivies de celles avec $\mathbf{b}=\langle 100 \rangle$ et $\frac{1}{2}\langle 111 \rangle$ dont le vecteur de Burgers est incliné par rapport à ce plan.
- Pour une taille d'environ 160 atomes, les cavités offrent une moindre résistance que les boucles les plus fortes (environ 30%). Cependant, les petites cavités (jusqu'à 87 atomes) demandent une contrainte critique plus forte que les petites boucles avec $\mathbf{b}=\frac{1}{2}\langle 111 \rangle$.
- La de τ_c dans la taille de l'obstacle est beaucoup plus forte pour les boucles avec $\mathbf{b}=\frac{1}{2}\langle 111 \rangle$ que pour les nanocavités.

Par ailleurs, les points en croix représentent les calculs de τ_c à partir de l'expression (A.1) en utilisant la valeur de $\Delta=1.5$ pour tous les obstacles. Ce faisant, on constate que les valeurs prédites par l'équation sont toujours trop importants par rapport aux résultats en DM. Terentyev et al. (2008b) expliquent cette différence par la non prise en compte des effets dynamiques ($T \neq 0$) dans l'approximation continue, ce qui en même temps remet en cause les approximations du durcissement basées sur la tension de ligne [Eq.II-2.4] et justifie l'intérêt de l'approche de simulation multi-échelle.

A.3.2 Dislocations vis

Dans cette partie, seules les interactions avec les boucles de SIA ont été traitées, soit avec un vecteur de Burgers de type $\mathbf{b}=\frac{1}{2}\langle 111 \rangle$ (Liu and Biner, 2008), soit avec un vecteur de Burgers de type $\mathbf{b}=\langle 100 \rangle$ (Terentyev et al., 2009). Les deux études utilisent le potentiel A04 (Ackland et al., 2004) introduit dans la partie précédente.

A.3.2.1 Boucles avec $\mathbf{b}=\frac{1}{2}\langle 111 \rangle$

Liu et Biner (2008) ont étudié l'interaction entre une dislocation vis de vecteur de Burgers $\mathbf{b}=\frac{1}{2}\langle 111 \rangle$ avec des boucles hexagonales de SIA du même Burgers pour :

- deux températures : $T=100\text{K}$ et $T=300\text{K}$,
- deux vitesses de déformation : 8.10^6 s^{-1} et 3.10^7 s^{-1} ,
- et trois tailles d'obstacle : 37, 127, et 271 SIA (soit 1,6, 3, et 4,4nm de diamètre)

Notons aussi qu'à différence des travaux précédents, Liu et Biner utilisent des conditions de surface libre dans la direction de la ligne. De même, le glissement dévié n'était pas possible puisque la sollicitation était dans le sens anti-maclage [§IV-2.4].

Dans leurs simulations ils observent deux mécanismes de réaction différents, qui semblent indépendants de la vitesse de déformation et de la température :

les petites boucles sont converties et absorbées dans un tour d'hélice [Fig. A-5a].

les grandes boucles (>127 SIA) interagissent en formant un segment $\langle 100 \rangle$ en commun avec la dislocation, qui s'échappe en laissant derrière une boucle $\langle 100 \rangle$ [Fig. A-5b].

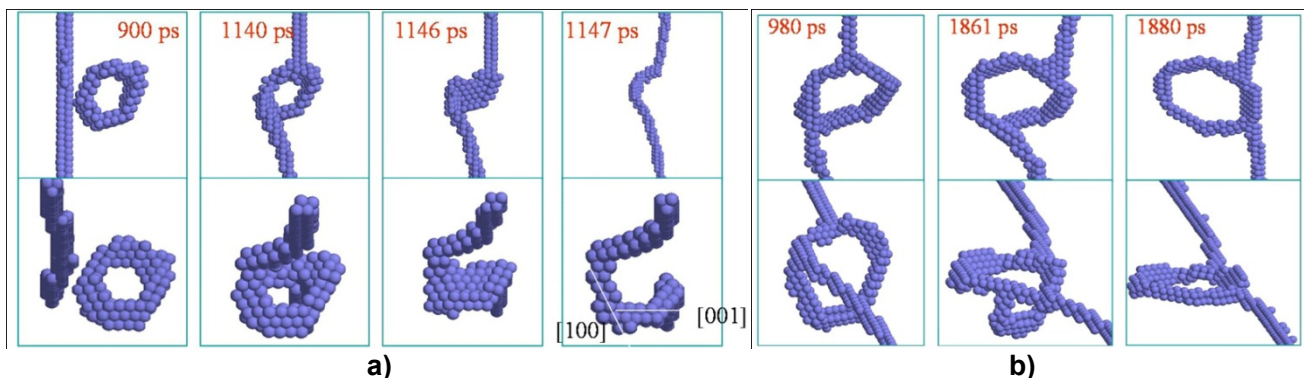


Fig. A-5 : Mécanismes d'interaction dans le fer CC entre une dislocation vis et une boucle de SIA de vecteur de Burgers $\mathbf{b}=\frac{1}{2}\langle 111 \rangle$ sous deux points de vue (Liu and Biner, 2008) : **a)** boucle de 1.6nm de diamètre ; **b)** boucle de 3nm de diamètre.

Le principe des réactions est donc très similaire à celui observé pour les dislocations coin (cf. §A.3.1.2.1). On notera cependant deux différences importantes :

- Contrairement aux doubles super-crans qui se forment dans les dislocations coin, les tours d'hélice ne sont glissiles que dans la direction du vecteur de Burgers. La dislocation doit donc fermer l'hélice en laissant une boucle $\langle 111 \rangle$ derrière elle pour franchir l'obstacle selon le mécanisme de Hirsch (1977).
- Les grandes boucles forment un segment $\langle 100 \rangle$ en commun avec la dislocation, mais alors que la coin réussit à absorber la boucle, la vis laisse derrière une boucle $\langle 100 \rangle$.

Le Tableau A-7 réunit les différentes contraintes critiques mesurées par Liu et Biner, ainsi que le coefficient α associé dans le modèle athermique d'Orowan ($\Delta\tau = \alpha\mu_0 b/L$) (Hirsch, 1977). On constate que les valeurs de ce dernier sont similaires à ceux estimés macroscopiquement à partir des mesures de la limite d'élasticité après irradiation aux neutrons (Nicol et al., 2001). Comme indiqué par Terentyev pour les dislocations coin, les valeurs prédites par la DM sont toutefois inférieures à celles obtenues par l'application de ce simple modèle (entre 0,5 et 0,6).

Taille de la boucle	τ_c (MPa)		α	
	100K	300K	100K	300K
37 SIA (1,6nm)	340	320	0,55	0,51
127 SIA (3nm)	310	250	0,47	0,38
271 SIA (4,4nm)	370	260	0,53	0,38

Tableau A-7 : Interaction dans le fer CC entre une dislocation vis et une boucle de SIA de vecteur de Burgers $b=\frac{1}{2}\langle 111 \rangle$ étudiée par DM (Liu and Biner, 2008): Contrainte critique (τ_c) et force d'ancrage dans le modèle d'Orowan (α).

A.3.2.2 *Boucles avec $b=\langle 100 \rangle$*

Pour compléter la cartographie complète des obstacles observés dans ces alliages, il ne reste plus que le cas d'interaction entre une dislocation vis et une boucle de vecteur de Burgers $b=\langle 100 \rangle$ (Terentyev et al., 2009). Dans ce cas, Terentyev et al. utilisent une vitesse de déformation de 10^7s^{-1} pour trois températures ($T=100, 300$, et 600K), avec des boucles formées par 128 SIA, carrées, et positionnées avec leur centre coïncidant avec le plan de glissement de la dislocation.

Comme dans le cas de la dislocation coin [§A.3.1.2.2], on retrouve divers mécanismes d'interaction, dont le résultat et la contrainte critique associés sont aussi différents :

- La boucle n'est pas absorbée ni transformée [Fig. A-6c].
- La boucle est absorbée en laissant un tour d'hélice sur la dislocation, qu'elle aura besoin de fermer avec l'émission d'une boucle $\frac{1}{2}\langle 111 \rangle$ [Fig. A-6b] comme dans le cas d'interaction avec boucles $\frac{1}{2}\langle 111 \rangle$ étudié par Liu et Biner (2008).
- La boucle est absorbée mais au lieu d'induire un tour d'hélice, elle fini par s'échapper en laissant derrière un complexe sessile double-boucle [Fig. A-6a] similaire à celui observé dans l'interaction des dislocations coin avec des boucles $\langle 100 \rangle$ [§A.3.1.2.2].

Dans les trois cas, la dislocation change de plan de glissement, parfois pour coïncider avec le coin inférieur, et parfois pour coïncider avec le coin inférieur.

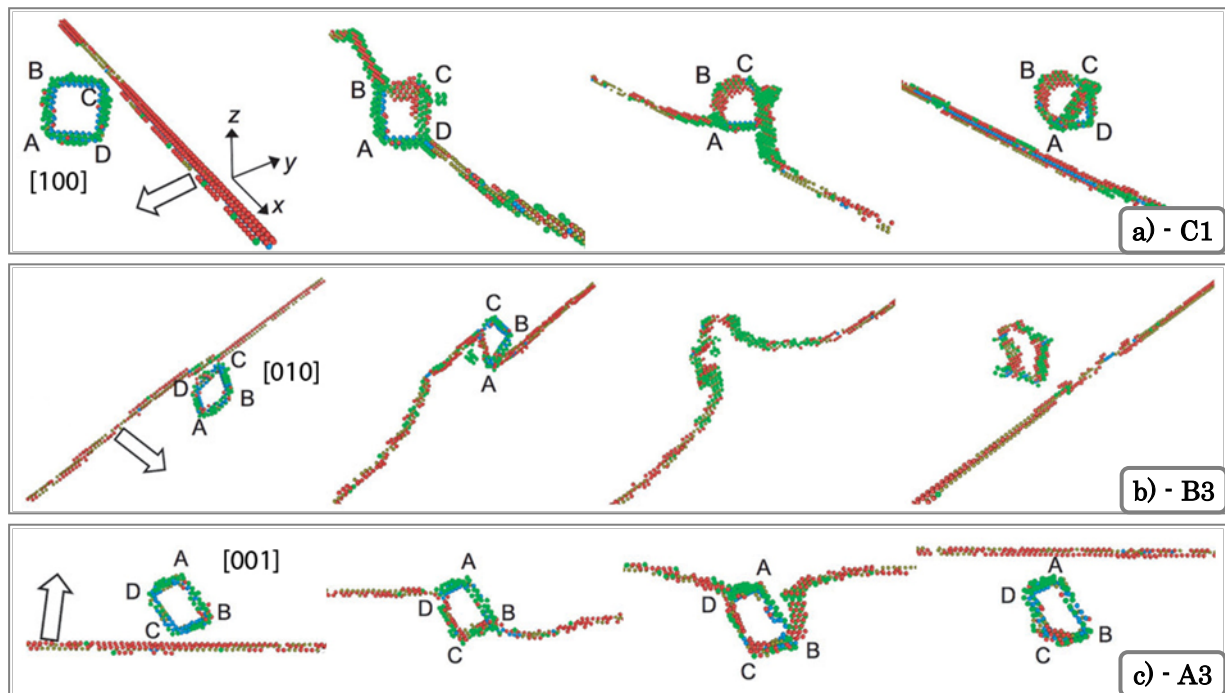


Fig. A-6 : Types d'interactions possibles entre une dislocation vis dans le fer CC et une boucle de SIA de vecteur de Burgers $b=\langle 100 \rangle$ observées en DM (Terentyev et al., 2009). (ref: codes utilisés par Terentyev et al. pour identifier chaque cas).

b_L	Temp. (K)	τ_c (MPa)	Reste	Code
[001]	100	255	Boucle inchangée $\mathbf{b} = [001]$	A1
	300	268	Boucle inchangée $\mathbf{b} = [001]$	A3
	600	376	Double boucle → boucle $\mathbf{b} = \frac{1}{2}[111]$	A6
[010]	100	57	Pas de réaction	B1
	300	433	Tour d'hélice → boucle $\mathbf{b} = \frac{1}{2}[111]$	B3
	600	395	Tour d'hélice → boucle $\mathbf{b} = \frac{1}{2}[111]$	B6
[100]	100	357	Double boucle	C1
	300	433	Tour d'hélice → boucle $\mathbf{b} = \frac{1}{2}[111]$	C2
	600	395	Tour d'hélice → boucle $\mathbf{b} = \frac{1}{2}[111]$	C6

Tableau A-8 : Interaction en DM entre une dislocation vis et une boucle de SIA avec $\mathbf{b} = \langle 100 \rangle$ pour trois températures dans le fer CC : contrainte critique, et reste de la réaction (Terentyev et al., 2009). (ref : codes utilisés par Terentyev et al.)

Cependant, contrairement au cas précédant, ici les mécanismes dépendent non seulement de la taille de la boucle, mais aussi de la température, qui affecte la capacité de glissement dévié de la dislocation vis. Le Tableau A-8 résume l'ensemble de ces résultats, où l'on observe que :

- en générale τ_c est plus importante à 300K qu'à 100K,
- le mécanisme qui offre le plus de résistance est celui qui nécessite la formation d'un tour d'hélice, favorisé à haute température,
- la dépendance en température du mécanisme du tour d'hélice est très faible, avec des contraintes critiques légèrement inférieures à plus haute température.

Ce dernier point est d'ailleurs consistant avec les observations de Liu et Biner (2008) pour des petites (37 SIA) boucles $\frac{1}{2}\langle 111 \rangle$.

A.3.2.3 *Comparaison entre les boucles avec $\mathbf{b} = \langle 100 \rangle$ et celles avec $\mathbf{b} = \frac{1}{2}\langle 111 \rangle$*

De même que pour les dislocations coin, nous pouvons comparer la force d'ancrage des deux types d'obstacles décrits dans cette partie. Pour s'affranchir des choix pour le module de cisaillement (μ) et l'espacement entre obstacles dans la simulation, Terentyev et al. préfèrent utiliser des unités de contrainte en $\mu\text{b/L}$. Ces résultats sont montrés dans la Fig. A-7.

On notera qu'à fin de renforcer certains points, Terentyev et al. ont simulé l'interaction avec des boucles $\frac{1}{2}\langle 111 \rangle$ circulaires (au lieu d'hexagonales dans l'étude de Liu et Biner) à 100K :

- La boucle avec $\mathbf{b} = \frac{1}{2}[111]$ produit un tour d'hélice, et demande une contrainte critique encore un peu plus élevée que celle obtenue à 300K pour les boucles [100]. La dépendance en température pour ce mécanisme semble en effet assez faible.
- La boucle avec $\mathbf{b} = \frac{1}{2}[1\bar{1}1]$ suit le mécanisme obtenu par Liu et Biner dans les grandes boucles.
- La boucle avec $\mathbf{b} = \frac{1}{2}[\bar{1}11]$ suit le mécanisme de restauration de la boucle originale à très faible contrainte critique, de manière similaire aux boucles [010].

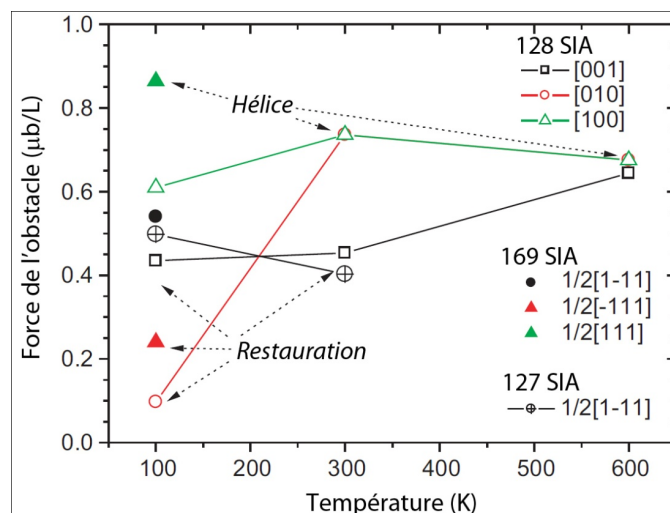


Fig. A-7 : Comparaison entre la force d'ancrage obtenue en DM pour une dislocation vis dans le fer CC traversant des boucles de dislocation de vecteur de Burgers $\langle 100 \rangle$ et $\frac{1}{2}\langle 111 \rangle$ pour différentes températures (Terentyev et al., 2009). Les valeurs obtenus pour les boucles à 127SIA sont issus des travaux de Liu et Biner (2008).

Globalement on retiendra que la force des obstacles dépend fortement du mécanisme d'interaction avec la dislocation, celui-ci dépendant de la taille, la nature, et l'orientation des boucles, ainsi que de la température de la réaction. Tant que le mécanisme ne change pas, et contrairement aux résultats obtenus pour la dislocation coin, la dépendance en taille et température reste assez faible.

A.4 Comportement macroscopique à l'état irradié

Tout au long de la vie d'une centrale, la cuve est soumise à l'irradiation émise par le cœur du réacteur, essentiellement de nature neutronique (endommageant), mais aussi gamma qui peut augmenter localement la température. Nous venons de détailler la nature et la portée de l'endommagement induit dans l'alliage par l'impact des neutrons [§A.2], ainsi que les interactions entre une dislocation et un de ces défauts. Nous nous centrerons ici sur son influence sur les propriétés mécaniques décrites dans le Chapitre II.

Comme nous venons de le voir, d'une manière générale l'impact de neutrons fortement énergétiques ($E > 0.1\text{MeV}$) engendre des défauts dans le réseau cristallin (boucles de dislocations, cavités) et favorise les mécanismes de diffusion et donc la précipitation des éléments d'alliage et/ou des impuretés. De nouveaux obstacles au glissement des dislocations vont donc apparaître dans le matériau, avec divers effets sur le comportement mécanique que nous revoyons par la suite.

Notons finalement que, la cuve étant l'élément critique pour la durée de vie d'une centrale, elle est protégée par un baffle interchangeable réalisé dans un acier austénitique 304L. De ce fait le flux neutronique reçu par l'acier de cuve est très faible, et la dose cumulée en fin de vie (30-40 ans) reste faible ($<1\text{ dpa}$) par rapport à celle reçue par les autres éléments proches du cœur.

A.4.1 Effets de l'irradiation sur la réponse en traction

A.4.1.1 *Acier de cuve*

Sur les essais de traction à température ambiante (T_A) en unités d'ingénieur [Fig. A-8a] on constate un durcissement de l'acier de cuve par l'irradiation, avec une augmentation de la limite d'élasticité qui s'accompagne d'une perte ductilité et d'allongement à la rupture. Auparavant, ceci a été expliqué par une perte de capacité d'écrouissage (Farrell and Byun, 2003), résultat de la formation de canaux de dislocations (Luft, 1991, Farrell et al., 2004).

Cependant, les analyses en unités vraies suggèrent que, pour une même contrainte, le comportement d'écrouissage n'est pas affecté par l'irradiation. Byun et al. (2007, 2008) montrent comment l'on peut superposer les courbes de traction rationnelles à différentes doses d'irradiation par simple décalage dans l'axe des abscisses [Fig. A-8b]. Ces observations pourraient indiquer que macroscopiquement l'irradiation aux neutrons a un effet semblable à celui de la déformation plastique sur le taux d'écrouissage (Mogford and Hull, 1963, Byun and Farrell, 2004), et donc que certains paramètres de contrainte vraie sont indépendants de la dose. Ceci a été vérifié pour l'acier de cuve A533B par Byun et al., comme le montre la Fig. A-9 où l'on constate que la contrainte à striction comme celle à rupture restent indépendantes de la dose.

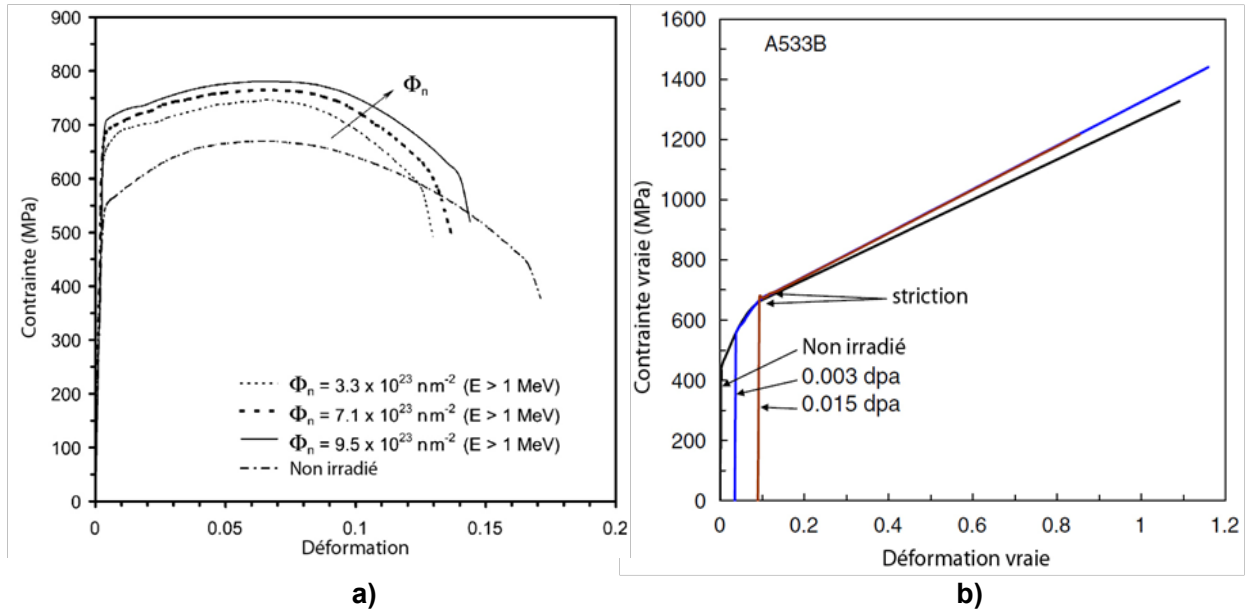


Fig. A-8 : Influence de l'irradiation aux neutrons sur le comportement mécanique en traction de l'acier de cuve à température ambiante: **(a)** en unités d'ingénieur après irradiation en réacteur (Hausild et al., 2005) ; **(b)** en unités vraies après irradiation à 80°C, et avec un décalage selon l'axe des abscisses jusqu'à atteindre un même niveau de contrainte (Byun et al., 2008).

Ces auteurs soutiennent l'idée que l'irradiation ne ferait qu'augmenter la limite d'élasticité, ce qui réduit de facto l'extension du domaine ductile. L'irradiation ne produirait donc pas d'adoucissement par l'effet de localisation de la déformation dans des canaux de dislocations tel qu'il avait été envisagé à partir des résultats en unités d'ingénieur. En effet, dans ces canaux on devrait avoir une chute importante de la contrainte locale de cisaillement après nettoyage des défauts, ce qui n'est pas observé en unités vraies. Ils défendent alors que, de même que dans des métaux précontraints (Cottrell and Stokes, 1955, Basinski and Jackson, 1965, Luft, 1991), la localisation microscopique (dans les canaux) n'est pas incompatible avec une déformation homogène de la matrice dans les matériaux polycristallins. Pour expliquer ceci Byun et al. (2006, 2007) proposent un modèle qui décrit l'écrouissage cinématique par des *back-stress* à longue portée, qui seraient fonction de l'empilement des dislocations aux joints de grain et du nombre de bandes de dislocations formées dans chaque grain. Le durcissement à courte portée par la forêt serait ainsi progressivement remplacé par un durcissement à longue portée lorsque la déformation se localise macroscopiquement.

Même si nous n'avons pas abordé ce problème pendant cette thèse, ce point précis devrait pouvoir être vérifié en DD par exemple en simulant un grain aux interfaces perméables seulement après une certaine contrainte critique, impliquant l'empilement de dislocations.

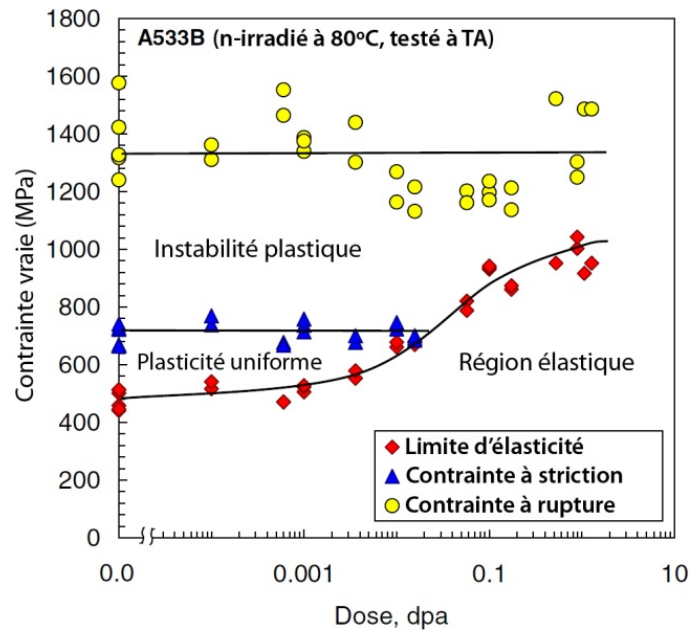


Fig. A-9 : Cartographie des modes de déformation à température ambiante en fonction de la dose pour l'acier de cuve A533B irradié à 80°C (Byun, 2007)

En ce qui concerne l'augmentation de la limite d'élasticité, elle est souvent approximée par des expressions où l'on additionne l'effet durcissant de chaque type d'obstacle en fonction de sa force d'ancrage (α), sa densité (ρ) et sa distribution de taille (f). Soit (Lemaignan, 2004) :

$$\Delta\sigma_y(\phi) = M\mu b \cdot \left[\sum_k \alpha_{obst}^k \sqrt{\rho_{obst}^k f_{obst}^k} + \alpha_d \left(\sqrt{\rho_{di}} - \sqrt{\rho_{do}} \right) \right] \quad (A.2)$$

Où :

- M : coefficient de Taylor pour les poly-cristaux.
- μ : module de cisaillement
- b : module du vecteur de Burgers

Dans l'expression (A.2), le premier facteur dans la parenthèse regroupe l'effet durcissant des défauts d'irradiation de nature diverse, alors que le deuxième prend en compte des possibles changements sur la densité de dislocations lors de l'irradiation (i : irradié ; o : non irradié). Comme on peut le voir dans l'Annexe A, les différents éléments de cette équation (force d'ancrage, densités, distribution de taille) sont étudiés par différentes techniques de simulation (notamment la DM) et différents moyens d'observation.

Par ailleurs, notons que la loi des mélanges (avec la somme des carrés des densités d'obstacles) fait encore objet de discussion. Par exemple, certains auteurs comme Bondarenko (2005) remettent en question la validité de l'additivité des contributions (avec ou sans l'exposant 1/2). Sur ce point, les simulations en DD pourraient également apporter des réponses comme l'ont esquissé récemment Queyreau (2008) et Naamane (2008).

A.4.1.2 Monocristaux de fer à basse température

Comme nous l'avons annoncé dans l'introduction, nous modéliserons en DD l'acier de cuve par une latte de ferrite. Il convient donc de regarder les effets de l'irradiation sur le matériau de base, i.e. le fer. Nous avançons ici le fait que la majorité des études réalisées sur les monocristaux de fer datent des années 60 à 80. En effet, la grande difficulté de réaliser des monocristaux conjuguée au caractère magnétique du fer en font une pratique difficile et rare.

A notre connaissance, seul le groupe de Kitajima et al. (1982) a réalisé des études après irradiation, en se limitant à étudier le régime thermiquement activé ($T < T_d$) pour lequel le comportement du fer- α est particulier. Ses résultats montrent des effets que l'on n'observe pas à température ambiante ou dans les matériaux CFC [Fig. A-10a]:

- Bien qu'il y ait un durcissement à basse température ($4 \rightarrow 20\text{K}$), l'irradiation diminue la limite d'élasticité entre 50 et 100K.
- La diminution de la limite d'élasticité s'accompagne d'une augmentation du taux d'écrouissage et de la contrainte à rupture.

Ces effets sont aussi présents mais moins marqués sur des échantillons contenant 150 ppm de carbone. Notons par ailleurs que ces deux observations supportent les thèses de Byun et al. (2008) en montrant que l'inverse de son raisonnement [§A.4.1.1] semble aussi rester valide.

Par ailleurs, tel que l'on observe sur la Fig. A-10b, lorsqu'elle adoucit le matériau l'irradiation semble aussi avoir une influence sur la dépendance angulaire de la limite d'élasticité, qui reste inchangée à 4K mais s'annule complètement dans les mesures à 90K.

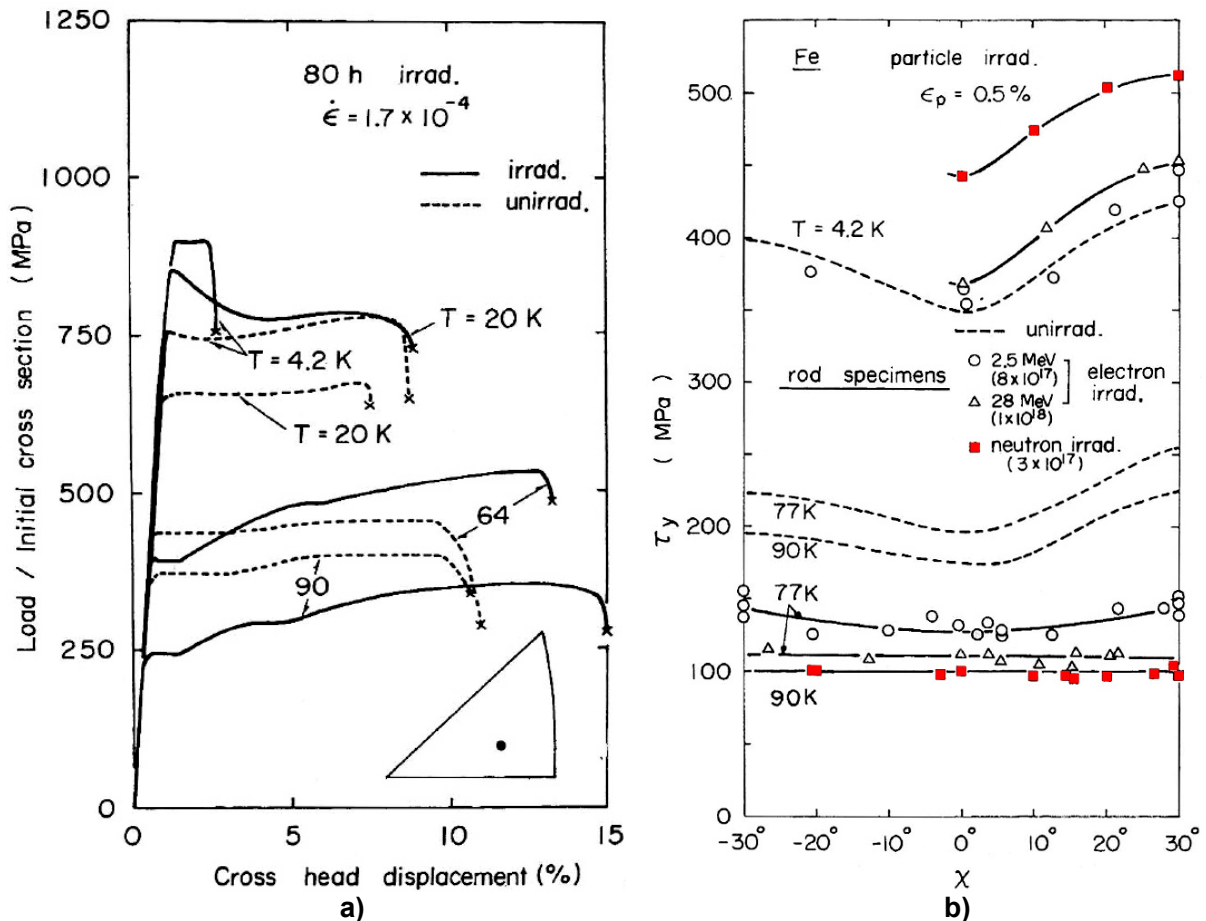


Fig. A-10 : Essais de traction sur des monocristaux de Fer pur irradié par neutrons à 5K (Kitajima et al., 1982): a) Limite d'élasticité à 4, 20, 64 et 90K ; b) Dépendance angulaire de la limite d'élasticité à 4K et 90K.

Pour expliquer ces résultats atypiques, Kitajima et al. suggèrent qu'à ces températures le champ de contrainte créé par les défauts induits par l'irradiation dans le monocristal pourrait aider la nucléation de doubles décrochements nécessaires à l'avancée des dislocations vis (cf. §III-3.2). Ce point particulier pourrait faire l'objet d'une étude en DM, mais il ne faut pas oublier que ces matériaux ont été irradiés dans des conditions très particulières (température de 5K), et qu'on ne dispose pas d'informations sur la nature précise de l'endommagement présent dans les échantillons en question.

Notons finalement que Kitajima et al. analysent aussi l'influence d'un recuit post irradiation dans une vaste plage de températures, avec des résultats différents entre le Fer pur et l'alliage Fe-C, mais nous ne rentrerons pas ici dans ces détails.

A.4.2 Effets sur la ténacité du matériau

Comme le montre la Fig. A-11a, le durcissement observé dans le paragraphe précédent s'accompagne d'une fragilisation de l'alliage, avec un décalage très clair de la TTDF vers des plus hautes températures. Par ailleurs, on notera sur la Fig. A-11b que cet élargissement du domaine fragile est bien plus limité lorsque l'irradiation s'effectue à la température de service du réacteur (~290°C) que lorsqu'elle a lieu à plus basse température (< 120°C). En effet, à plus haute température des phénomènes de restauration limitent en continu le caractère endommageant de l'irradiation. Rappelons ici que les études de Byun et al. et Kitajima et al. citées précédemment concernent toutes les deux des irradiations à basse température, et donc plus endommageantes que celles observées dans les réacteurs pour la cuve.

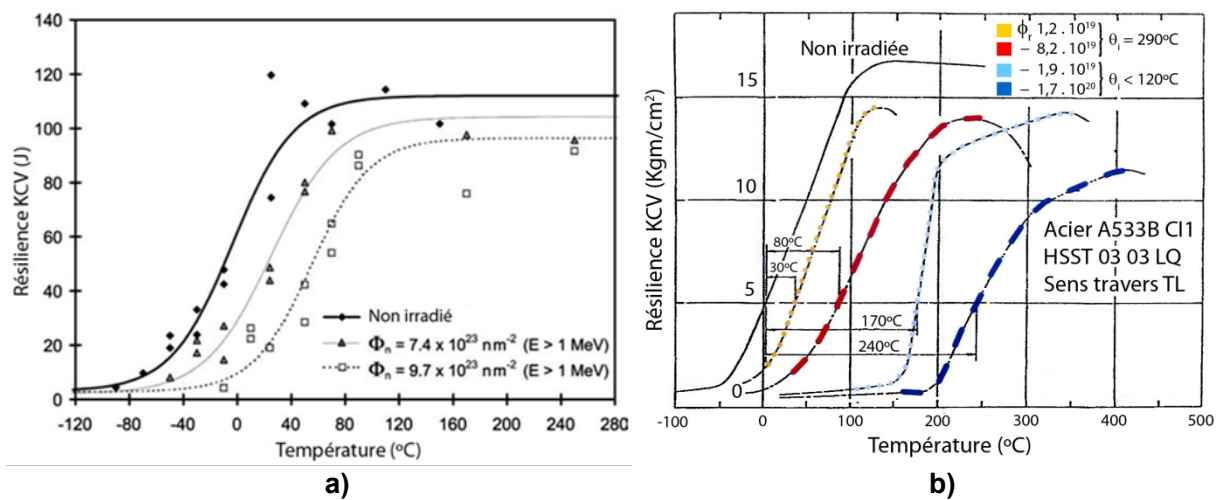


Fig. A-11 : Impact de l'irradiation sur la ténacité de l'acier de cuve : **a)** essais de Charpy après irradiation en milieu réacteur (Hausild et al., 2005) ; **b)** influence de la température d'irradiation et dose (Lemaignan, 2004).

En ce qui concerne l'influence de l'irradiation sur les valeurs de K_{IC} , on rappellera que les éprouvettes CT nécessaires pour ce type de mesure ne se prêtent pas à l'irradiation en réacteur. On préfère ainsi irradier des échantillons Charpy pour étudier le décalage des températures de référence, puis appliquer ce décalage aux courbes de K_{IC} obtenues sur des échantillons non irradiés. La température de référence de base est la plus haute du domaine fragile (*Reference Temperature for Nil Ductility Transition*, RT_{NDT}), pour laquelle on mesure le décalage induit par l'irradiation (ΔRT_{NDT}). Dans la pratique, on définit une courbe enveloppe appelée « Formule d'Irradiation Supérieure » (FIS) en fonction de la composition de l'alliage, que l'on utilise pour les analyses de sûreté, et dont la pertinence est vérifiée périodiquement par des essais dans la campagne de surveillance (Lemaignan, 2004):

$$\Delta RT_{NDT} = 8 + \left[24 + 1537 \cdot (\%P - 0.008) + 238 \cdot (\%Cu - 0.08) + 192 \cdot (\%Ni^2 \%Cu) \right] \cdot (\phi / 10^{19})^{0.35} \quad (\text{A.3})$$

Où :

- P , Cu , et Ni^2 : teneur (% en masse) en chacune de ces espèces,
- ϕ : fluence de neutrons fortement énergétiques ($E > 1 \text{ MeV}$), mesurée en n/cm^2

On remarquera dans l'équation (A.3) [Fig. A-13] l'exposant 1/3 pour la fluence, ce qui prend en compte la saturation des effets d'irradiation à forte dose (visible sur la Fig. A-11b), due au recouvrement des différents défauts induits dans l'alliage.

Pour estimer la durée de vie acceptable pour la cuve, on comparera les valeurs de K_{IC} décalées en fonction de ΔRT_{NDT} au chargement en K_I lors d'un accident de type APRP. La Fig. A-12 illustre ce point de façon schématique.

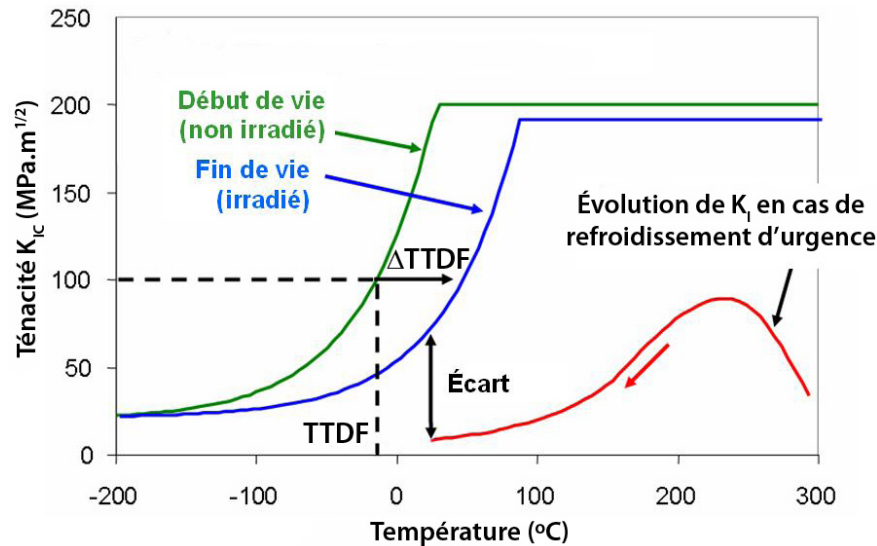


Fig. A-12 : Décalage de la température de transition ductile-fragile (TTDF) avec l'irradiation dans l'acier de cuve ; comparaison avec le trajet de chargement K_I lors d'un refroidissement d'urgence du cœur en situation d'APRP.

Puisque c'est le décalage de RT_{NDT} (et plus généralement de la TTDF) avec l'irradiation qui limite la durée de vie de la cuve, et donc de la centrale et le grand investissement qu'elle suppose, on comprend bien la volonté de comprendre ce phénomène afin de réduire sa valeur tout en gardant la marge de sécurité souhaitée. Pour illustrer ce point, la Fig. A-13 compare pour une même nuance d'acier les résultats de la formule de ΔRT_{NDT} utilisée actuellement en France (FIS) à ceux obtenus par la formule préconisée par la norme NUREG 1.99 Rev1 aux États-Unis. La différence essentielle (à l'avantage du cas français) provient de la prise en compte de l'effet endommageant croisé Cu-Ni lors du choix de l'alliage (Lemaignan, 2004).

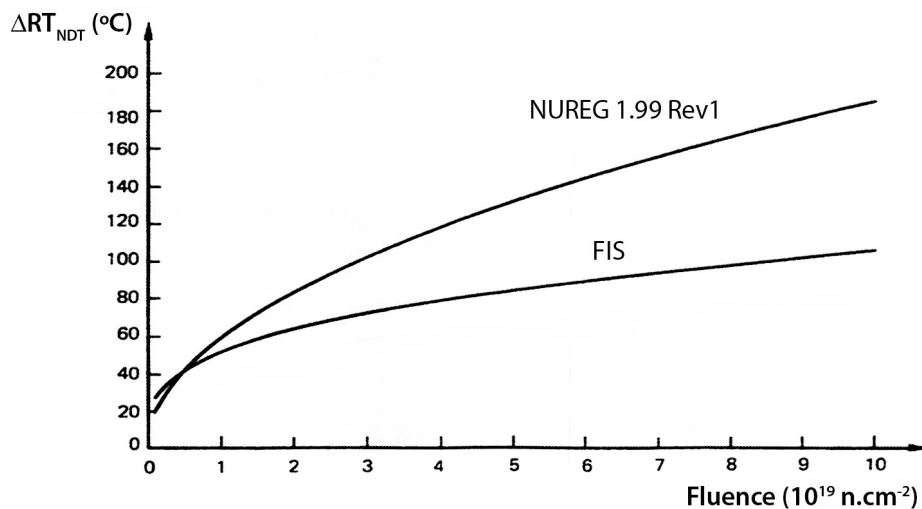


Fig. A-13 : Comparaison entre les valeurs de ΔRT_{NDT} obtenus avec les formules FIS et NUREG 1.99 Rev1 (Lemaignan, 2004)

D'une manière générale, le but ultime de la démarche multi-échelle qui nous occupe, ainsi que des démarches statistiques de type approche locale, est d'apporter les éléments de compréhension pour pouvoir affiner autant que possible l'estimation de ΔRT_{NDT} .

A.5 Références

- ACKLAND, G. J., BACON, D. J., CALDER, A. F. & HARRY, T. 1997. Computer simulation of point defect properties in dilute Fe-Cu alloy using a many-body interatomic potential. *Philosophical Magazine a-Physics of Condensed Matter Structure Defects and Mechanical Properties*, 75, 713-732.
- ACKLAND, G. J., MENDELEV, M. I., SROLOVITZ, D. J., HAN, S. & BARASHEV, A. V. 2004. Development of an interatomic potential for phosphorus impurities in alpha-iron. *Journal of Physics-Condensed Matter*, 16, S2629-S2642.
- BACON, D. J., CALDER, A. F., HARDER, J. M. & WOODING, S. J. Year. COMPUTER-SIMULATION OF LOW-ENERGY DISPLACEMENT EVENTS IN PURE BCC AND HCP METALS. In, 1993. Elsevier Science Bv, 52-58.
- BACON, D. J. & DELARUBIA, T. D. 1994. MOLECULAR-DYNAMICS COMPUTER-SIMULATIONS OF DISPLACEMENT CASCADES IN METALS. *Journal of Nuclear Materials*, 216, 275-290.
- BACON, D. J., GAO, F. & OSETSKY, Y. N. 2000. The primary damage state in fcc, bcc and hcp metals as seen in molecular dynamics simulations. *Journal of Nuclear Materials*, 276, 1-12.
- BACON, D. J., KOCKS, U. F. & SCATTERGRO 1973. EFFECT OF DISLOCATION SELF-INTERACTION ON OROWAN STRESS. *Philosophical Magazine*, 28, 1241-1263.
- BACON, D. J. & OSETSKY, Y. N. 2007. The atomic-scale modeling of dislocation-obstacle interactions in irradiated metals. *Jom*, 59, 40-45.
- BACON, D. J., OSETSKY, Y. N. & RONG, Z. 2006. Computer simulation of reactions between an edge dislocation and glissile self-interstitial clusters in iron. *Philosophical Magazine*, 86, 3921-3936.
- BACON, D. J., OSETSKY, Y. N., STOLLER, R. & VOSKOBOINIKOV, R. E. 2003. MD description of damage production in displacement cascades in copper and alpha-iron. *Journal of Nuclear Materials*, 323, 152-162.
- BARASHEV, A. V., GOLUBOV, S. I., BACON, D. J., FLEWITT, P. E. J. & LEWIS, T. A. 2004. Copper precipitation in Fe-Cu alloys under electron and neutron irradiation. *Acta Materialia*, 52, 877-886.
- BASINSKI, Z. S. & JACKSON, P. J. 1965. INSTABILITY OF WORK HARDENED STATE .2. SLIP IN ALIEN DISLOCATION DISTRIBUTIONS. *Physica Status Solidi*, 10, 45-–.
- BECQUART, C. S., DOMAIN, C., LEGRIS, A. & VAN DUYSSEN, J. C. 2000. Influence of the interatomic potentials on molecular dynamics simulations of displacement cascades. *Journal of Nuclear Materials*, 280, 73-85.
- BECQUART, C. S., DOMAIN, C., VAN DUYSSEN, J. C. & RAULOT, J. M. 2001. The role of Cu in displacement cascades examined by molecular dynamics. *Journal of Nuclear Materials*, 294, 274-287.
- BERGNER, F., ULBRICHT, A., GOKHMAN, A. & ERAK, D. 2008. Nature of defect clusters in neutron-irradiated iron-based alloys deduced from small-angle neutron scattering. *Journal of Nuclear Materials*, 373, 199-205.
- BONDARENKO, A. I., SAVIN, M. M. & SUBBOTIN, A. V. 2005. Model of combined hardening of crystalline materials by coherent and incoherent precipitates in application to irradiated iron-based alloys with BCC structure. *Atomic Energy*, 98, 317-323.
- BULLOUGH, T. J., ENGLISH, C. A. & EYRE, B. L. 1991. LOW-ENERGY HEAVY-ION IRRADIATIONS OF COPPER AND MOLYBDENUM AT LOW-TEMPERATURES. *Proceedings of the Royal Society of London Series a-Mathematical Physical and Engineering Sciences*, 435, 85-107.
- BYUN, T. S. 2007. Dose dependence of true stress parameters in irradiated bcc, fcc, and hcp metals. *Journal of Nuclear Materials*, 361, 239-247.
- BYUN, T. S. & FARRELL, K. 2004. Plastic instability in polycrystalline metals after low temperature irradiation. *Acta Materialia*, 52, 1597-1608.
- BYUN, T. S., FARRELL, K. & LI, M. K. 2008. Deformation in metals after low-temperature irradiation: Part II - Irradiation hardening, strain hardening, and stress ratios. *Acta Materialia*, 56, 1056-1064.
- BYUN, T. S. & HASHIMOTO, N. 2006. Strain hardening and long-range internal stress in the localized deformation of irradiated polycrystalline metals. *Journal of Nuclear Materials*, 354, 123-130.

- CHAUSSIDON, J., FIVEL, M. & RODNEY, D. Year. The glide of screw dislocations in bcc Fe: Atomistic static and dynamic simulations. *In*, 2006. Pergamon-Elsevier Science Ltd, 3407-3416.
- COTTRELL, A. H. & STOKES, R. J. 1955. EFFECTS OF TEMPERATURE ON THE PLASTIC PROPERTIES OF ALUMINIUM CRYSTALS. *Proceedings of the Royal Society of London Series a-Mathematical and Physical Sciences*, 233, 17-34.
- COWLEY, J. M. & MOODIE, A. F. 1957. THE SCATTERING OF ELECTRONS BY ATOMS AND CRYSTALS .1. A NEW THEORETICAL APPROACH. *Acta Crystallographica*, 10, 609-619.
- DELAYE, J. M. & GHALEB, D. 1997. Molecular dynamics simulation of low-energy atomic displacement cascades in a simplified nuclear glass. *Journal of Nuclear Materials*, 244, 22-28.
- DOMAIN, C., BECQUART, C. S. & MALERBA, L. 2004. Simulation of radiation damage in Fe alloys: an object kinetic Monte Carlo approach. *Journal of Nuclear Materials*, 335, 121-145.
- DOMAIN, C. & MONNET, G. 2005. Simulation of screw dislocation motion in iron by molecular dynamics simulations. *Physical Review Letters*, 95, 4.
- EASON, E. D., WRIGHT, J. E. & ODETTE, G. R. 1996. Improved Embrittlement Correlations for Reactor Pressure Vessel Steels. NUREG/CR-6551.
- EASON, E. D., WRIGHT, J. E. & ODETTE, G. R. 1998. Improved Embrittlement Correlations for Reactor Pressure Vessel Steels. NUREG/CR-6551.
- ELDRUP, M. & SINGH, B. N. 2000. Study of defect annealing behaviour in neutron irradiated Cu and Fe using positron annihilation and electrical conductivity. *Journal of Nuclear Materials*, 276, 269-277.
- ELDRUP, M., SINGH, B. N., ZINKLE, S. J., BYUN, T. S. & FARRELL, K. 2002. Dose dependence of defect accumulation in neutron irradiated copper and iron. *Journal of Nuclear Materials*, 307, 912-917.
- ENGLISH, C. A. & JENKINS, M. L. 1987. Insight into cascade processes arising from studies of cascade collapse. *Materials Science Forum*, 15-18, 1003-1022.
- ERGINSOY, C., ENGLERT, A. & VINEYARD, G. H. 1964. DYNAMICS OF RADIATION DAMAGE IN BODY-CENTERED CUBIC LATTICE. *Physical Review a-General Physics*, 133, A595-&.
- EYRE, B. L. 1962a. DIRECT OBSERVATIONS OF NEUTRON IRRADIATION DAMAGE IN ALPHA-IRON. *Philosophical Magazine*, 7, 2107-&.
- EYRE, B. L. 1962b. OBSERVATIONS OF SLIP BANDS IN IRRADIATED PURE IRON. *Philosophical Magazine*, 7, 1609-&.
- EYRE, B. L. & BARTLETT, A. F. 1965. AN ELECTRON MICROSCOPE STUDY OF NEUTRON IRRADIATION DAMAGE IN ALPHA-IRON. *Philosophical Magazine*, 12, 261-&.
- EYRE, B. L. & BARTLETT, A. F. 1973. DAMAGE STRUCTURE FORMED IN MOLYBDENUM BY IRRADIATION IN A FAST-REACTOR AT 650 DEGREES C. *Journal of Nuclear Materials*, 47, 143-154.
- EYRE, B. L. & BULLOUGH, R. 1965. ON FORMATION OF INTERSTITIAL LOOPS IN BCC METALS. *Philosophical Magazine*, 12, 31-&.
- EYRE, B. L. & MAHER, D. M. 1971. NEUTRON IRRADIATION DAMAGE IN MOLYBDENUM .5. MECHANISMS OF VACANCY AND INTERSTITIAL LOOP GROWTH DURING POST-IRRADIATION ANNEALING. *Philosophical Magazine*, 24, 767-&.
- EYRE, B. L., MAHER, D. M. & PERRIN, R. C. 1977. ELECTRON-MICROSCOPE IMAGE-CONTRAST FROM SMALL DISLOCATION LOOPS .2. APPLICATION OF THEORETICAL PREDICTIONS TO DEFECT ANALYSIS IN IRRADIATED METALS. *Journal of Physics F-Metal Physics*, 7, 1371-&.
- FARRELL, K. & BYUN, T. S. 2003. Tensile properties of ferritic/martensitic steels irradiated in HFIR, and comparison with spallation irradiation data. *Journal of Nuclear Materials*, 318, 274-282.
- FARRELL, K., BYUN, T. S. & HASHIMOTO, N. 2003. Mapping Flow Localization Processes in Deformation of Irradiated Reactor Structural Alloys. OAK RIDGE NATIONAL LABORATORY.
- FARRELL, K., BYUN, T. S. & HASHIMOTO, N. 2004. Deformation mode maps for tensile deformation of neutron-irradiated structural alloys. *Journal of Nuclear Materials*, 335, 471-486.

- FINNIS, M. W. & SINCLAIR, J. E. 1984. A SIMPLE EMPIRICAL N-BODY POTENTIAL FOR TRANSITION-METALS. *Philosophical Magazine a-Physics of Condensed Matter Structure Defects and Mechanical Properties*, 50, 45-55.
- FISHER, S. B., HARBOTTLE, J. E. & ALDRIDGE, N. 1985. RADIATION HARDENING IN MAGNOX PRESSURE-VESSEL STEELS. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London Series a-Mathematical Physical and Engineering Sciences*, 315, 301-332.
- FREDERIKSEN, S. L. & JACOBSEN, K. W. 2003. Density functional theory studies of screw dislocation core structures in bcc metals. *Philosophical Magazine*, 83, 365-375.
- FU, C. C., DALLA TORRE, J., WILLAIME, F., BOCQUET, J. L. & BARBU, A. 2005. Multiscale modelling of defect kinetics in irradiated iron. *Nature Materials*, 4, 68-74.
- FUJII, K. & FUKUYA, K. 2005. Characterization of defect clusters in ion-irradiated A533B steel. *Journal of Nuclear Materials*, 336, 323-330.
- GAO, F., BACON, D. J., OSETSKY, Y. N., FLEWITT, P. E. J. & LEWIS, T. A. 2000. Properties and evolution of sessile interstitial clusters produced by displacement cascades in alpha-iron. *Journal of Nuclear Materials*, 276, 213-220.
- GIBSON, J. B., GOLAND, A. N., MILGRAM, M. & VINEYARD, G. H. 1960. DYNAMICS OF RADIATION DAMAGE. *Physical Review*, 120, 1229-1253.
- GUINAN, M. W. & KINNEY, J. H. 1982. MOLECULAR DYNAMIC CALCULATIONS OF ENERGETIC DISPLACEMENT CASCADES. *Journal of Nuclear Materials*, 104, 1319-1323.
- HASEGAWA, M. & NAGAI, Y. 2008. Irradiation-Induced Nanostructural Evolution in RPV Steels Studied by Positron Annihilation and 3D Atom Probe. Institute for Materials Research, Tohoku University, JAPAN.
- HASHIMOTO, N., BYUN, T. S., FARRELL, K. & ZINKLE, S. J. 2004. Deformation microstructure of neutron-irradiated pure polycrystalline metals. *Journal of Nuclear Materials*, 329-33, 947-952.
- HAUSILD, P., KYTKA, M., KARLIK, M. & PESEK, P. 2005. Influence of irradiation on the ductile fracture of a reactor pressure vessel steel. *Journal of Nuclear Materials*, 341, 184-188.
- HERNANDEZ MAYORAL, M. & G MEZ BRICE O, D. 2006. TEM characterisation of ion irradiated ultra high pure iron. *Integrated Project PERFECT*. CIEMAT - Departamento de Tecnología.
- HIRSCH, P. B. Year. In: SMALLMAN, R. E. & HARRIS, J. E., eds. Vacancies '76 : proceedings of a conference on "Point defect behaviour and diffusional processes", 1977 London. Metals Society, 95.
- HOELZER, D. T. & EBRAHIMI, F. Year. Effect of copper and nickel on the neutron irradiation damage in iron alloys. In: ROBERTSON, I. M., REHN, L. E., ZINKLE, S. J. & PHYTHIAN, W. J., eds. Microstructure of Irradiated Materials. Symposium, 29 Nov.-1 Dec. 1995 Boston, MA., Mater. Res. Soc, 57-62.
- HORTON, L. L. & FARRELL, K. 1984. THE TEMPERATURE-DEPENDENCE OF THE DAMAGE MICROSTRUCTURES IN NEUTRON-IRRADIATED VANADIUM. *Journal of Nuclear Materials*, 122, 687-692.
- JENKINS, M. L., ENGLISH, C. A. & EYRE, B. L. 1978. HEAVY-ION IRRADIATION OF ALPHA-IRON. *Philosophical Magazine a-Physics of Condensed Matter Structure Defects and Mechanical Properties*, 38, 97-114.
- JOHNSON, R. A. 1964. INTERSTITIALS + VACANCIES IN ALPHA IRON. *Physical Review a-General Physics*, 134, 1329-&.
- KAWANISHI, H., ISHINO, S. & KURAMOTO, E. 1986. 14 MEV NEUTRON-IRRADIATION OF VANADIUM ALLOY (V-1 ATMOSPHERIC PERCENT-B). *Journal of Nuclear Materials*, 141, 899-902.
- KIRITANI, M. 1986. OBSERVATION AND ANALYSIS OF DEFECT STRUCTURE EVOLUTION FROM RADIATION-DAMAGE BY D-T FUSION NEUTRONS. *Journal of Nuclear Materials*, 137, 261-278.
- KIRITANI, M., YOSHIDA, N. & ISHINO, S. 1984. THE JAPANESE EXPERIMENTAL PROGRAM ON RTNS-II OF DT-NEUTRON IRRADIATION OF MATERIALS. *Journal of Nuclear Materials*, 122, 602-607.
- KIRITANI, M., YOSHIE, T. & KOJIMA, S. 1986. FACTORS CONTROLLING THE NATURE AND AMOUNT OF RESIDUAL DEFECTS IN NEUTRON-IRRADIATED MATERIALS. *Journal of Nuclear Materials*, 141, 625-632.

- KIRK, M. A., ROBERTSON, I. M., JENKINS, M. L., ENGLISH, C. A., BLACK, T. J. & VETRANO, J. S. 1987. THE COLLAPSE OF DEFECT CASCADES TO DISLOCATION LOOPS. *Journal of Nuclear Materials*, 149, 21-28.
- KITAJIMA, K., ABE, H., AONO, Y., KURAMOTO, E. & TAKAMURA, S. 1982. EFFECTS OF LOW-TEMPERATURE NEUTRON-IRRADIATION ON THE MECHANICAL-PROPERTIES OF BCC METALS. *Journal of Nuclear Materials*, 108, 436-441.
- KWON, J., MOHAMED, H. F. M., KIM, Y. M. & KIM, W. 2007. Positron annihilation study and computational modeling of defect production in neutron-irradiated reactor pressure vessel steels. *Nuclear Instruments & Methods in Physics Research Section B-Beam Interactions with Materials and Atoms*, 262, 255-260.
- LAMBRECHT, M. & ALMAZOUZI, A. 2007a. Characterization of neutron irradiated samples (REVE matrix): Positron annihilation and mechanical properties. *Integrated Project PERFECT*. SCK-CEN.
- LAMBRECHT, M. & ALMAZOUZI, A. 2007b. Characterization of neutron irradiated samples (REVE matrix): Post-irradiation annealing of selected alloys. *Integrated Project PERFECT*. SCK-CEN.
- LEMAIGNAN, C. 2004. *Science des matériaux pour le nucléaire*, Les Ulis, France, EDP Sciences.
- LITTLE, E. A., BULLOUGH, R. & WOOD, M. H. 1980. ON THE SWELLING RESISTANCE OF FERRITIC STEEL. *Proceedings of the Royal Society of London Series a-Mathematical Physical and Engineering Sciences*, 372, 565-&.
- LIU, X. Y. & BINER, S. B. 2008. Molecular dynamics simulations of the interactions between screw dislocations and self-interstitial clusters in body-centered cubic Fe. *Scripta Materialia*, 59, 51-54.
- LUFT, A. 1991. MICROSTRUCTURAL PROCESSES OF PLASTIC INSTABILITIES IN STRENGTHENED METALS. *Progress in Materials Science*, 35, 97-204.
- MARIAN, J., WIRTH, B. D., CARO, A., SADIGH, B., ODETTE, G. R., PERLADO, J. M. & DE LA RUBIA, T. D. 2002a. Dynamics of self-interstitial cluster migration in pure alpha-Fe and Fe-Cu alloys. *Physical Review B*, 65, 11.
- MARIAN, J., WIRTH, B. D., SCHAUBLIN, R., PERLADO, J. M. & DE LA RUBIA, T. D. 2002b. (100)-loop characterization in alpha-Fe: comparison between experiments and modeling. *Journal of Nuclear Materials*, 307, 871-875.
- MASTERS, B. C. 1965. DISLOCATION LOOPS IN IRRADIATED IRON. *Philosophical Magazine*, 11, 881-&.
- MESLIN, E., BARBU, A., PAREIGE, P. & RADIGUET, B. 2007. TEM study of interstitials dislocation loops formed in ferritic alloys under 1.5 MeV Kr ions irradiation. *Integrated Project PERFECT*. CEA/DEN/DMN/SRMP.
- MILESHINA, L. & NORDLUND, A. 2007. Pulsed Beam PAS characterisation of Ion irradiated materials. *Integrated Project PERFECT*. Chalmers University of Technology.
- MOGFORD, I. L. & HULL, D. 1963. EFFECT OF TEMPERATURE AND NEUTRON IRRADIATION ON YIELD AND WORK HARDENING IN IRON. *Journal of the Iron and Steel Institute*, 201, 55-&.
- NAAMANE, S. 2008. *Etude de la déformation plastique de la ferrite à basse température: simulations de dynamique des dislocations*. Docteur de l'Université Pierre et Marie Curie Thesis (PH D), Université Pierre et Marie Curie.
- NICOL, A. C., JENKINS, M. L. & KIRK, M. A. Year. Matrix damage in iron. In: LUCAS, G. E., SNEAD, L. L., KIRK, M. A. & ELLIMAN, R. G., eds. *Microstructural Processes in Irradiated Materials - 2000. Symposium*, 27-29 Nov. 2001 Boston, MA,. Mater. Res. Soc., R1.3.1-R1.3.6.
- NOGARET, T., ROBERTSON, C. & RODNEY, D. 2007. Atomic-scale plasticity in the presence of Frank loops. *Philosophical Magazine*, 87, 945-966.
- ODETTE, G. R. Year. Radiation induced microstructural evolution in reactor pressure vessel steels. In: ROBERTSON, I. M., REHN, L. E., ZINKLE, S. J. & PHYTHIAN, W. J., eds. *Microstructure of Irradiated Materials. Symposium*, 29 Nov.-1 Dec. 1995 Boston, MA,. Mater. Res. Soc., 137-148.
- ODETTE, G. R. 1998. Neutron irradiation effects in reactor pressure vessel steels and weldments. IAEA IWG-LMNPP-98/3.
- ODETTE, G. R. & LUCAS, G. E. 1998. Recent progress in understanding reactor pressure vessel steel embrittlement. *Radiation Effects and Defects in Solids*, 144, 189-231.

- ODETTE, G. R. & LUCAS, G. E. 2001. Embrittlement of nuclear reactor pressure vessels. *Jom-Journal of the Minerals Metals & Materials Society*, 53, 18-22.
- ODETTE, G. R. & WIRTH, B. D. 1997. A computational microscopy study of nanostructural evolution in irradiated pressure vessel steels. *Journal of Nuclear Materials*, 251, 157-171.
- ODETTE, G. R., YAMAMOTO, T. & KLINGENSMITH, D. 2005. On the effect of dose rate on irradiation hardening of RPV steels. *Philosophical Magazine*, 85, 779-797.
- OSETSKY, Y. N. & BACON, D. J. 2003. Void and precipitate strengthening in alpha-iron: what can we learn from atomic-level modelling? *Journal of Nuclear Materials*, 323, 268-280.
- OSETSKY, Y. N., BACON, D. J. & MOHLES, V. 2003a. Atomic modelling of strengthening mechanisms due to voids and copper precipitates in alpha-iron. *Philosophical Magazine*, 83, 3623-3641.
- OSETSKY, Y. N., BACON, D. J. & SERRA, A. 1999. Thermally activated glide of small dislocation loops in metals. *Philosophical Magazine Letters*, 79, 273-282.
- OSETSKY, Y. N., BACON, D. J., SERRA, A., SINGH, B. N. & GOLUBOV, S. I. 2000a. Stability and mobility of defect clusters and dislocation loops in metals. *Journal of Nuclear Materials*, 276, 65-77.
- OSETSKY, Y. N., BACON, D. J., SERRA, A., SINGH, B. N. & GOLUBOV, S. I. 2003b. One-dimensional atomic transport by clusters of self-interstitial atoms in iron and copper. *Philosophical Magazine*, 83, 61-91.
- OSETSKY, Y. N., SERRA, A., SINGH, B. N. & GOLUBOV, S. I. 2000b. Structure and properties of clusters of self-interstitial atoms in fcc copper and bcc iron. *Philosophical Magazine a-Physics of Condensed Matter Structure Defects and Mechanical Properties*, 80, 2131-2157.
- PHYTHIAN, W. J., STOLLER, R. E., FOREMAN, A. J. E., CALDER, A. F. & BACON, D. J. 1995. A COMPARISON OF DISPLACEMENT CASCADES IN COPPER AND IRON BY MOLECULAR-DYNAMICS AND ITS APPLICATION TO MICROSTRUCTURAL EVOLUTION. *Journal of Nuclear Materials*, 223, 245-261.
- QUEYREAU, S. 2008. Docteur de l'Université Pierre et Marie Curie Thesis (PH D), Université Pierre et Marie Curie.
- ROBERTSON, I. M., JENKINS, M. L. & ENGLISH, C. A. 1982. LOW-DOSE NEUTRON-IRRADIATION DAMAGE IN ALPHA-IRON. *Journal of Nuclear Materials*, 108, 209-221.
- RONG, Z., OSETSKY, Y. N. & BACON, D. J. 2005a. A model for the dynamics of loop drag by a gliding dislocation. *Philosophical Magazine*, 85, 1473-1493.
- RUHLE, M. & CRUMP, J. C. 1970. Density and size distribution of defect clusters in neutron-irradiated copper. *Physica Status Solidi A*, 2, 257-260.
- RUSSELL, K. C. & BROWN, L. M. 1972. DISPERSION STRENGTHENING MODEL BASED ON DIFFERING ELASTIC-MODULI APPLIED TO IRON-COPPER SYSTEM. *Acta Metallurgica*, 20, 969-&.
- SAARINEN, K. 2000. Characterization of native point defects in GaN by positron annihilation spectroscopy. In: MANASREH, M. O. (ed.) *III-Nitride Semiconductors: Electrical, Structural and Defects Properties*. 1 edition (Nov 2000) ed. Amsterdam: Elsevier Science.
- SCATTERGOOD, R. O. & BACON, D. J. 1982. THE STRENGTHENING EFFECT OF VOIDS. *Acta Metallurgica*, 30, 1665-1677.
- SIKKA, V. K. & MOTEFF, J. 1973. RAFTING IN NEUTRON-IRRADIATED TUNGSTEN. *Journal of Nuclear Materials*, 46, 217-219.
- SINGH, B. N. & ZINKLE, S. J. Year. DEFECT ACCUMULATION IN PURE FCC METALS IN THE TRANSIENT REGIME - A REVIEW. In, 1993. Elsevier Science Bv, 212-229.
- SONEDA, N. & DE LA RUBIA, T. D. 1998. Defect production, annealing kinetics and damage evolution in alpha-Fe: an atomic-scale computer simulation. *Philosophical Magazine a-Physics of Condensed Matter Structure Defects and Mechanical Properties*, 78, 995-1019.
- SONEDA, N., ISHINO, S. & DE LA RUBIA, T. D. 2001. Vacancy loop formation by 'cascade collapse' in alpha-Fe: a molecular dynamics study of 50 keV cascades. *Philosophical Magazine Letters*, 81, 649-659.
- SONEDA, N., ISHINO, S., TAKAHASHI, A. & DOHI, K. 2003. Modeling the microstructural evolution in bcc-Fe during irradiation using kinetic Monte Carlo computer simulation. *Journal of Nuclear Materials*, 323, 169-180.
- SPACZER, M., CARO, A., VICTORIA, M. & DELARUBIA, T. 1994. COMPUTER-SIMULATION OF DISORDERING KINETICS IN IRRADIATED A(3)B INTERMETALLIC COMPOUNDS. *Journal of Nuclear Materials*, 212, 164-167.

- SPITZIG, W. A. & KEH, A. S. 1970a. EFFECT OF ORIENTATION AND TEMPERATURE ON PLASTIC FLOW PROPERTIES OF IRON SINGLE CRYSTALS. *Acta Metallurgica*, 18, 611-&.
- STADELMANN, P. A. 1987. EMS - A SOFTWARE PACKAGE FOR ELECTRON-DIFFRACTION ANALYSIS AND HREM IMAGE SIMULATION IN MATERIALS SCIENCE. *Ultramicroscopy*, 21, 131-145.
- STOLLER, R. E. 1996. Point defect survival and clustering fractions obtained from molecular dynamics simulations of high energy cascades. *Journal of Nuclear Materials*, 233, 999-1003.
- STOLLER, R. E. 2000. The role of cascade energy and temperature in primary defect formation in iron. *Journal of Nuclear Materials*, 276, 22-32.
- STOLLER, R. E., ODETTE, G. R. & WIRTH, B. D. 1997. Primary damage formation in bcc iron. *Journal of Nuclear Materials*, 251, 49-60.
- TERENTYEV, D., BACON, D. J. & OSETSKY, Y. N. 2008a. Interaction of an edge dislocation with voids in alpha-iron modelled with different interatomic potentials. *Journal of Physics-Condensed Matter*, 20, 11.
- TERENTYEV, D., BACON, D. J. & OSETSKY, Y. N. 2009. Reactions between a $1/2\langle 111 \rangle$ screw dislocation and $\langle 100 \rangle$ interstitial dislocation loops in alpha-iron modelled at atomic scale. *Philosophical Magazine*, i-First, 1-15.
- TERENTYEV, D., GRAMMATIKOPOULOS, P., BACON, D. J. & OSETSKY, Y. N. 2008b. Simulation of the interaction between an edge dislocation and a '100' interstitial dislocation loop in alpha-iron. *Acta Materialia*, 56, 5034-5046.
- TERENTYEV, D., MALERBA, L., BACON, D. J. & OSETSKY, Y. N. 2007. The effect of temperature and strain rate on the interaction between an edge dislocation and an interstitial dislocation loop in alpha-iron. *Journal of Physics-Condensed Matter*, 19.
- VICTORIA, M., BALUC, N., BAILAT, C., DAI, Y., LUPPO, M. I., SCHAUBLIN, R. & SINGH, B. N. 2000. The microstructure and associated tensile properties of irradiated fcc and bcc metals. *Journal of Nuclear Materials*, 276, 114-122.
- WARD, A. E. & FISHER, S. B. 1989. DISLOCATION LOOP GROWTH IN PURE IRON UNDER ELECTRON-IRRADIATION. *Journal of Nuclear Materials*, 166, 227-234.
- WIRTH, B. D., ODETTE, G. R., MAROUDAS, D. & LUCAS, G. E. 1997. Energetics of formation and migration of self-interstitials and self-interstitial clusters in alpha-iron. *Journal of Nuclear Materials*, 244, 185-194.
- WIRTH, B. D., ODETTE, G. R., MAROUDAS, D. & LUCAS, G. E. 2000. Dislocation loop structure, energy and mobility of self-interstitial atom clusters in bcc iron. *Journal of Nuclear Materials*, 276, 33-40.
- YOSHIDA, N., AKASHI, Y., KITAJIMA, K. & KIRITANI, M. 1985. FORMATION OF SECONDARY DEFECTS IN COPPER BY 14 MEV NEUTRON-IRRADIATION AND THEIR EFFECTS ON MICROSTRUCTURE EVOLUTION. *Journal of Nuclear Materials*, 133, 405-409.
- YOSHIDA, N., KIRITANI, M. & FUJITA, F. E. 1975. ELECTRON RADIATION-DAMAGE OF IRON IN HIGH-VOLTAGE ELECTRON-MICROSCOPE. *Journal of the Physical Society of Japan*, 39, 170-179.
- ZINKLE, S. J. 1987. MICROSTRUCTURE AND PROPERTIES OF COPPER-ALLOYS FOLLOWING 14-MEV NEUTRON-IRRADIATION. *Journal of Nuclear Materials*, 150, 140-158.
- ZINKLE, S. J. & MATSUKAWA, Y. 2004. Observation and analysis of defect cluster production and interactions with dislocations. *Journal of Nuclear Materials*, 329-33, 88-96.
- ZINKLE, S. J. & SINGH, B. N. 2006. Microstructure of neutron-irradiated iron before and after tensile deformation. *Journal of Nuclear Materials*, 351, 269-284.

B. Ajustement empirique de l'énergie d'activation

Table des matières

B. Ajustement empirique de l'énergie d'activation.....	203
B.1 Introduction.....	203
B.2 Une nouvelle méthode d'ajustement de la loi de Kocks	204
B.3 Ajustement à partir des données sur les monocristaux de fer	205
B.3.1 Ajustement à partir des mesures absolues de $\tau_y(T)$	205
B.3.2 Ajustement à partir de la dérivée de $\tau_y(T)$	206
B.4 Ajustement à partir des données sur l'acier 16MND5	206
B.4.1 Ajustement à partir des mesures absolues de $\tau_y(T)$	207
B.4.2 Ajustement à partir de la dérivée de $\tau_y(T)$	208
B.5 Discussion.....	209
B.6 Références.....	211

B.1 Introduction

Dans le Chapitre III nous avons décrit en détail la manière d'ajuster l'expression empirique de Kocks et al. (1975f) pour l'énergie d'activation $\Delta G(\tau^*)$ à partir de mesures de la variation de la limite d'élasticité avec la température ($\tau_y(T)$) [§III-3.2.4.5]. Au vu des difficultés à dériver une expression théorique pour cette dernière [§III-4], nous avons décidé de continuer sur la voie d'identification expérimentale, utilisée jusqu'à ce jour dans tous les modèles de mobilité des dislocations vis dans le fer CC en dynamique de dislocations (DD). Conformément à Kocks *et al.* (1975f) l'énergie d'activation que nous avons utilisé pour les nouveaux modèles à forte contrainte décrits dans le Chapitre V [§V-2.2 et §V-2.3], répond à la forme suivante [§III-3.2.4.5] :

$$\Delta G(\tau^*, T) \approx \Delta H(\tau^*) = \Delta H_0 \left[1 - \left(\frac{\tau^*}{\tau_0} \right)^p \right]^q \quad (\text{B.1})$$

avec :

- ΔH_0 , τ_0 , p et q : paramètres ajustables.
- τ^* : contrainte effective nécessaire appliquée sur la ligne [$0 < \tau^* < \tau_0$].

Dans l'analyse des modèles utilisés précédemment en DD [§III-3.6] nous avons signalé le caractère quelque peu arbitraire du choix de la température athermique (T_{at}), ainsi que les deux approches différentes utilisées pour étudier l'acier bainitique des cuves. En effet, alors que Chaussidon (2007) a ajusté les paramètres de l'équation (B.1) directement à partir des mesures sur l'acier 16MND5, Naamane (2008) avait préféré, compte tenu des conditions des simulations, utiliser les mesures sur des monocristaux de fer. Nous avons alors apporté des premiers éléments pour motiver notre choix ; nous reviendrons ici sur ces deux possibilités afin de l'arrêter définitivement.

Par ailleurs, nous proposons aussi une nouvelle méthode d'ajustement à partir de la dérivée par rapport à la température des mesures de $\tau_y(T)$, dont le but est de s'affranchir du choix a priori de T_{at} . Dans la suite, nous appliquerons cette nouvelle méthode pour les deux cas d'étude (monocristaux de fer et bainite), et nous la comparerons avec les ajustements obtenus selon la méthode traditionnelle.

Finalement, notons que dans tous les cas, nous ne reviendrons pas ici sur l'approximation implicite dans l'équation (B.1) [$\Delta G \approx \Delta H$]. Ce point fait justement l'objet principal de la discussion du Chapitre V [§].

B.2 Une nouvelle méthode d'ajustement de la loi de Kocks

Comme décrit dans [§III-3.2.4.5], on ne peut pas obtenir directement les mesures de $\Delta G(\tau^*)$. De ce fait on utilise la relation $\Delta G(T) = C \cdot k_B T$ [cf. eq. (3.74)] où C dépend du matériau et peut être déterminée par des essais de saut de vitesse de déformation et température. L'expression utilisée pour ajuster les différents paramètres de l'équation (B.1) s'écrit alors :

$$\tau^*(T) = \tau_0 \left[1 - \left(\frac{C \cdot k_B T}{\Delta H_0} \right)^{1/q} \right]^{1/p} \quad (\text{B.2})$$

Dans la pratique, on ajuste (B.2) à partir de mesures expérimentales de la limite d'élasticité en traction à différentes températures, $\tau_y(T)$, en faisant l'hypothèse suivante :

$$\tau^*(T) \approx \tau_y(T) - \tau_y(T_{at}) \quad (\text{B.3})$$

Dans cette démarche, toute la dépendance en température de τ_y est incluse dans celle de τ^* , et on peut alors écrire l'expression de T_{at} à partir de (B.2) comme :

$$T_{at} = \frac{\Delta H_0}{C \cdot k_B} \quad (\text{B.4})$$

Ainsi, le choix de T_{at} nécessaire pour utiliser (3.74) fixe en même temps la valeur de ΔH_0 . Pour s'affranchir de ce choix, qui peut conduire à sous-estimer la valeur de T_{at} , nous proposons une méthodologie différente à partir de la dérivée de l'expression (B.2) par rapport à la température. La nouvelle équation d'ajustement s'écrit alors :

$$\frac{d\tau^*(T)}{dT} = -\frac{\tau_0}{pq \cdot T_{at}^{1/q}} \cdot \left[1 - \left(\frac{T}{T_{at}} \right)^{1/q} \right]^{1/p-1} \cdot T^{1/q-1} \quad (\text{B.5})$$

où T_{at} (et donc ΔH_0) devient un paramètre ajustable comme les trois autres.

Les points expérimentaux sont obtenus par une évaluation de la dérivée à partir des taux d'accroissement des mesures expérimentales de $\tau_y(T)$, soit :

$$\left. \frac{d\tau_y^*(T)}{dT} \right|_{T=T_{\text{exp}}} \approx \left. \frac{\Delta \tau_y}{\Delta T} \right|_{T=T_{\text{exp}}} \quad (\text{B.6})$$

Dans la suite, nous comparons les résultats d'ajustement calculés avec les expressions (B.2) et (B.5) sur les données expérimentales mesurées pour la bainite et pour les monocristaux de fer.

B.3 Ajustement à partir des données sur les monocristaux de fer

Nous reprenons ici les données expérimentales utilisées par Naamane (2008), issues des travaux de Spitzig et Keh (1970a), Quesnel *et al.* (1975), et Kuramoto *et al.* (1979). Nous avons volontairement omis les données relatives aux travaux de Spitzig concernant des monocristaux avec une concentration d'impuretés C-Ti (37ppm) plus importante que les autres (Spitzig, 1973). Nous conservons cependant l'analyse de Naamane concernant le « stade 0 », ainsi que la valeur de $C = 25$ dans l'équation (B.4).

B.3.1 Ajustement à partir des mesures absolues de $\tau_y(T)$

L'ajustement proposé par Naamane aboutit à des paramètres p et q similaires aux évolutions prédites par des modèles (typiquement $p=0.5$ $q=1$) tels que celui exposé par Hirth et Lothe (1982), malgré la prise en compte de la partie athermique de la contrainte. De ce fait, la valeur proposée pour ΔH_o (0,84eV) suppose une température athermique de 390K, alors que Naamane elle-même estime T_{at} proche de 300K.

Nous avons donc refait l'ajustement en supposant T_{at} de l'ordre de la température ambiante, et la contrainte athermique égale à la moyenne des contraintes relevées à $T > T_{at}$. La Fig. B-1 et le Tableau B-1 présentent nos ajustements obtenus en utilisant dans un premier temps l'ensemble des résultats (courbe repérée par « Tous »), puis ceux de la série la plus complète (Kuramoto *et al.*, 1979). L'ajustement de Naamane est rappelé dans le tableau à des fins de comparaison.

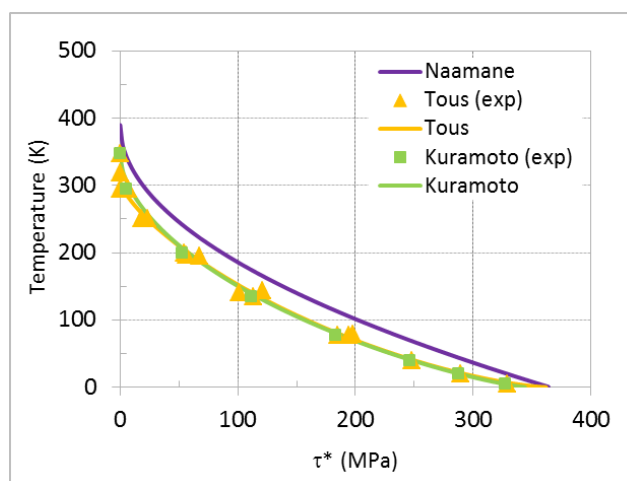


Fig. B-1 : Ajustement de $\Delta G(\tau)$ à partir des valeurs de $\tau_y(T)$ mesurées sur des monocristaux de fer par Spitzig et Keh (1970a), Quesnel *et al.* (1975), et Kuramoto *et al.* (1979). Les points expérimentaux utilisés sont ceux relevés par Naamane au stade 0. Pour l'ajustement, on utilise la formule (B.2) avec $T_{at} = 293K$.

Ajustement	Paramètres					Qualité	
	τ_o (MPa)	ΔH_o (eV)	T_{at} (K)	p	q	R^2	SSE
Naamane	365	0,84	390	0,5	1	-	-
Tous	363 (275 – 451)	0,658	305 (290 – 321)	0,744 (0,54 – 0,95)	1,437 (0,75 – 2,16)	0,994	929,6
Kuramoto	345 (339 – 350)	0,743	332 (328 – 336)	0,574 (0,55 – 0,60)	1,226 (1,17 – 1,28)	1	0,4437

Tableau B-1 : Paramètres et qualité de l'ajustement de $\Delta G(\tau^*)$ à partir de mesures $\tau_y(T)$ pour les monocristaux de fer [Fig. B-1]. Les bornes de confiance à 95% sont notées entre parenthèses.

B.3.2 Ajustement à partir de la dérivée de $\tau_y(T)$

La Fig. B-2 et le Tableau B-2 montrent les résultats de l'ajustement obtenus avec cette autre méthode [§B.2].

Dans un premier temps, les points « expérimentaux » obtenus à partir de l'expression (B.6) sont calculés à partir de chacune des trois séries de données (« *Tous_série* »). Il faut noter cependant qu'aucune série ne dispose de points montrant l'entrée dans le régime athermique. Cela conduit logiquement à des températures athermiques bien plus élevées ($T_{at} > 400\text{K}$) que celles obtenues avec l'ajustement en $\tau_y(T)$ [Tableau B-2], ce qui illustre le nombre insuffisant de mesures utilisées pour établir l'approximation (B.6). Nous proposons alors un deuxième ajustement en utilisant l'ensemble des données « *Tous_mix* ».

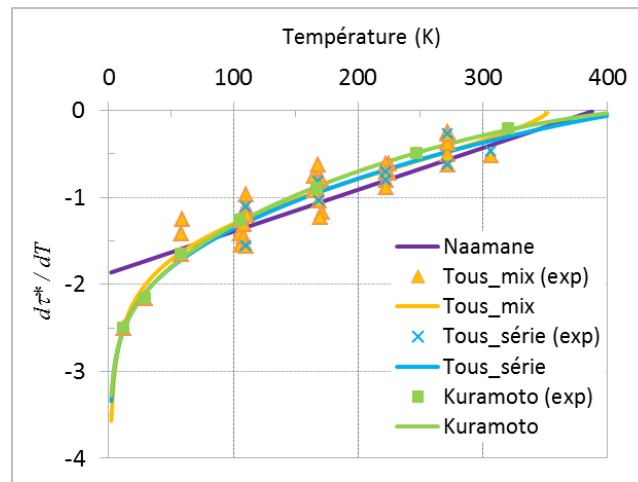


Fig. B-2 : Ajustement de $\Delta G(\tau)$ à partir des valeurs de $d\tau_y / dT$ calculées selon (B.6) pour des mesures de $\tau_y(T)$ sur des monocristaux de fer (Spitzig and Keh, 1970a, Quesnel et al., 1975, Kuramoto et al., 1979). Les points expérimentaux utilisés sont ceux relevés par Naamane au stade 0. Pour l'ajustement nous utilisons la formule (B.5) avec : toutes les données confondues (« *Tous_mix* »), toutes les données séparées par séries (« *Tous_série* »), et seulement la série de Kuramoto *et al.* 1979 (« *Kuramoto* »).

Ajustement	Paramètres					Qualité	
	τ_0 (MPa)	ΔH_0 (eV)	T_{at} (K)	p	q	R^2	SSE
Naamane	365	0,84	390	0,5	1	-	-
Tous_mix	359 (315 – 403)	0,761	353 (151 – 556)	0,593 (0,21 – 0,97)	1,223 (0,99 – 1,46)	0,8725	1,133
Tous_série	377 (321 – 433)	0,924	429 (-5 – 863)	0,4617 (-0,06 – 0,99)	1,154 (0,91 – 1,34)	0,9594	0,2598
Kuramoto	354 (323 – 384)	0,922	428 (153 – 702)	0,416 (0,10 – 0,73)	1,135 (1,00 – 1,28)	0,9983	0,0074

Tableau B-2 : Paramètres et qualité de l'ajustement de $\Delta G(\tau)$ à partir des valeurs de $d\tau_y / dT$ calculés pour les monocristaux de fer [Fig. B-2]. Les bornes de confiance à 95% sont notées entre parenthèses.

B.4 Ajustement à partir des données sur l'acier 16MND5

Considérant la bainite comme un polycristal, on fait le lien entre la cisssion résolue (τ_y) et la limite d'élasticité macroscopique (σ_y) à travers le facteur de Taylor ($M \approx 0.3$) :

$$\tau_y = M\sigma_y \quad (\text{B.7})$$

Par ailleurs, la valeur de C retenue pour obtenir ΔH_o à partir de l'expression (B.4) est $C = 34$ (Libert, 2007).

En ce qui concerne les données expérimentales de $\sigma_y(T)$, nous avons eu recours à la base d'essais dont dispose le Service de Recherches Métallurgiques Appliquées (SRMA) du CEA-Saclay sur l'acier 16MND5. Parmi la totalité, nous avons choisi ceux réalisés :

- sur le matériau de base à l'état forgé, comme dans la cuve des réacteurs.
- avec des vitesses de déformation de $0.5 \cdot 10^{-3} \text{ s}^{-1}$, car ceux-ci constituent les séries les plus fournies et les mieux documentées.

Ces données sont référencées avec les codes de coupon internes 262-M3, 380-M1, et A76.

B.4.1 Ajustement à partir des mesures absolues de $\tau_y(T)$

Pour réaliser ces ajustements, nous avons fixé la température athermique à la température ambiante, soit $T_{at}=293\text{K}$. La Fig. B-3 présente le meilleur ajustement obtenu, dont les valeurs des paramètres et indicateurs de confiance sont rapportées au Tableau B-3. On constate alors que, dû au manque de données à faible température ($T < 77\text{K}$), l'extrapolation de la limite d'élasticité aux plus faibles températures n'est pas fiable, et les résultats ainsi obtenus ne sont pas utilisables.

Nous avons alors tenté un deuxième ajustement en introduisant de façon *ad-hoc* la valeur de $\tau^*(0)$ obtenue pour des monocristaux de fer [Fig. B-3, Tableau B-3], soit 360 MPa. Notons toutefois que cela revient à fixer *a priori* deux paramètres physiques : ΔH_o (par le biais de T_{at}), et τ_o .

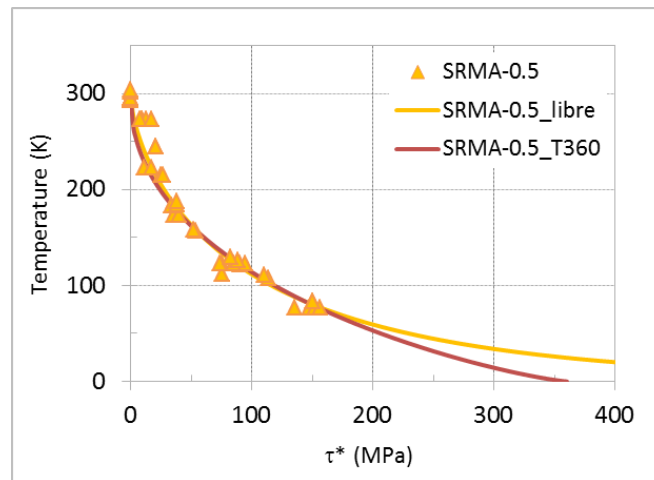


Fig. B-3 : Ajustement de $\Delta G(\tau)$ à partir des valeurs de $\tau_y(T)$ pour l'acier 16MND5 mesurées au SRMA pour une vitesse de déformation de 0.5 s^{-1} . On utilise la formule (B.2) avec $T_{at} = 293\text{K}$, τ_o étant soit libre soit fixée à 360 MPa.

Ajustement	Paramètres					Qualité	
	τ_o (MPa)	ΔH_o (eV)	T_{at} (K)	p	q	R ²	SSE
Libre	5589	0,865	295,2 (291,7 – 298,6)	0,69 (0,54 – 0,85)	15,37 (-133 – 163)	0,9918	3253
$\tau_p = 360\text{MPa}$	360	0,865	295,1 (292,1 – 298,0)	0,48 (0,44 – 0,52)	1,23 (1,12 – 1,33)	0,9939	2419

Tableau B-3 : Paramètres et qualité de l'ajustement de $\Delta G(\tau)$ à partir de mesures $\tau_y(T)$ pour l'acier 16MND5 [Fig. B-3]. On utilise la formule (B.2) avec $T_{at} = 293\text{K}$, τ_o étant soit libre soit fixée à 360 MPa. Les bornes de confiance à 95% sont notées entre parenthèses.

B.4.2 Ajustement à partir de la dérivée de $\tau_y(T)$

En analysant les données expérimentales de la Fig. B-4 on observe que la valeur de $\Delta\tau_y/\Delta T$ semble tendre vers une constante différente de zéro, c'est-à-dire, qu'on n'atteint pas de régime véritablement athermique dans la plage de températures analysée. Dans les ajustements correspondants, nous avons ainsi rajouté une constante [paramètre libre noté B dans (B.8)] à l'équation (B.5), dont la valeur est proche de -0,12 MPa/K, sans laquelle T_{at} peut atteindre des valeurs supérieures à 600K.

$$\frac{d\tau^*(T)}{dT} = B - \frac{\tau_0}{pq \cdot T_{at}^{1/q}} \cdot \left[1 - \left(\frac{T}{T_{at}} \right)^{1/q} \right]^{1/p-1} \cdot T^{1/q-1} \quad (B.8)$$

Par ailleurs, comme dans le paragraphe précédent, l'ajustement avec tous les paramètres libres conduit à des valeurs irréalistes de τ_0 : trop faibles en utilisant toutes les mesures expérimentales, trop élevées en n'utilisant que celles de la série la plus complète : le 262-M3 (Libert, 2007). Encore une fois, le manque de données expérimentales à basse température limite fortement l'identification des paramètres. Nous présentons donc l'ajustement obtenu en imposant $\tau_0 = 360$ MPa.

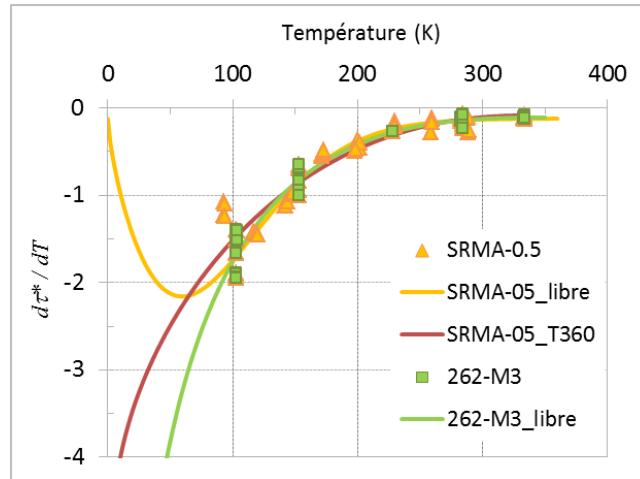


Fig. B-4 : Ajustement de $\Delta G(\tau)$ à partir des valeurs de $d\tau_y/dT$ calculées selon (B.6) pour l'acier 16MND5. On utilise la formule (B.5) en rajoutant une constante B proche de 0,12 MPa/K [cf. eq. (B.8)]. Deux séries de données sont utilisées : toutes celles disponibles avec $\dot{\epsilon} = 0.5$ (τ_0 étant soit libre soit fixée à 360 MPa), et seulement celles du coupon 262-M3 (τ_0 étant libre).

Ajustement	Paramètres					Qualité	
	τ_0 (MPa)	ΔH_0 (eV)	T_{at} (K)	p	q	R ²	SSE
Libre	256 (53 – 459)	3,938	1344 (-5 . 10 ⁴ – 5.10 ⁴)	0,012 (-0,86 – 0,89)	0,586 (-0,12 – 1,28)	0,9675	0,8791
262-M3 libre	614 (-2192 – 3422)	1,025	350 (-318 – 1019)	0,285 (-0,94 – 1,51)	1,419 (-4,75 – 7,59)	0,9673	0,6653
$\tau_p = 360$MPa	360	0,982	335	0,317 (0,27 – 0,37)	1,105 (1,02 – 1,19)	0,9038	2,822

Tableau B-4 : Paramètres et qualité de l'ajustement de $\Delta G(\tau)$ à partir des valeurs de $d\tau_y/dT$ pour l'acier 16MND5 [Fig. B-4]. On utilise la formule (B.5) en rajoutant une constante proche de 0,12. Les bornes de confiance à 95% sont notées entre parenthèses.

B.5 Discussion

Comme nous l'avons vu, que ce soit à partir de $\tau_y(T)$ [eq. (B.2)] ou $d\tau_y/dT$ [eq. (B.5)], l'ajustement des paramètres de (B.1) à partir des données expérimentales est très sensible aux hypothèses utilisées.

En ce qui concerne les **monocristaux**, l'ajustement à partir des valeurs de $d\tau_y/dT$ est imprécis lorsqu'on s'approche du régime athermique. Cependant, même en utilisant toutes les données disponibles, on constate que T_{at} devrait être plus élevée que la valeur communément choisie à 293-300K, sans pour autant atteindre les 390K obtenus par Naamane. Dans tous les cas, la contrainte critique (τ_o) est proche de 360MPa.

Pour la **bainite**, l'analyse $d\tau_y/dT$ met tout d'abord en évidence l'existence de mécanismes thermiquement activés autres que ceux présents dans le fer pur. Ces mécanismes pourraient être liés à l'interaction des dislocations avec les atomes en solution solide, tel que décrit par Curtin *et al.* (2006) dans les matériaux CFC, et plus récemment analysé par Clouet *et al.* (2008) dans le fer CC. Dans tous les cas, alors que la température athermique du mécanisme de dd s'évalue autour de 300K, celle observée pour la bainite avoisine $T_{at}=600K$.

De plus, le manque de données expérimentales aux températures inférieures à 78K rend impossible l'extrapolation fiable de τ^* à 0K, quelle que soit la méthode. Nous avons toutefois proposé des ajustements qui reprennent la valeur de τ_o obtenue pour les monocristaux, ce qui conduit à des valeurs plus raisonnables pour les autres paramètres. Pour l'ajustement à l'aide de τ_y cela suppose cependant d'avoir fixé de façon *ad-hoc* les deux paramètres clés (T_{at} et τ_p).

Pour l'ajustement à l'aide de $d\tau_y/dT$, bien que T_{at} reste libre, on pourrait juger que la modélisation des autres mécanismes thermiquement activés par une constante [§B.4.2] est insatisfaisante.

Finalement, nous constatons qu'une fois la partie athermique retranchée et après application du facteur de Taylor (M choisi à 0,3), on obtient des valeurs de la contrainte critique plus faibles dans la bainite que celles mesurées dans les monocristaux [Fig. B-5]. Ainsi, on ne peut pas justifier l'emploi des données sur la bainite par la recherche de contraintes d'activation plus élevées dues aux effets d'alliage. Bien évidemment, la valeur de M peut être sujette à des variations, mais les données quantitatives sont difficiles à obtenir.

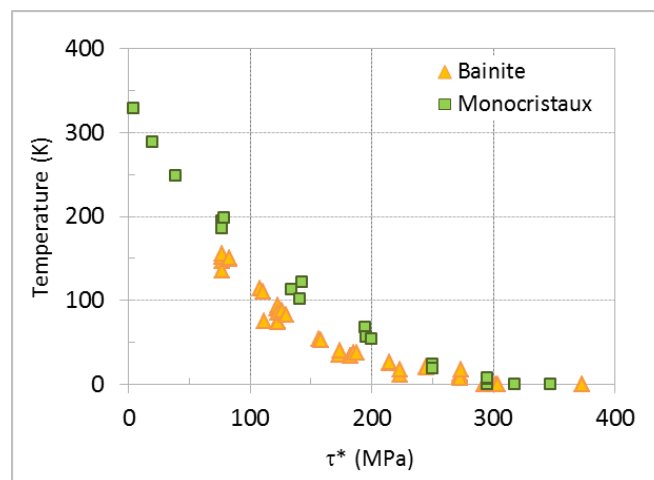


Fig. B-5 : Comparaison entre la composante thermiquement activée des mesures expérimentales de la cission résolue critique en fonction de la température pour l'acier 16MND5 et les monocristaux de fer pur. Pour les monocristaux, on utilise la contrainte critique au stade 0, alors que pour la bainite la contrainte relevée est la limite d'élasticité traditionnelle à 0,2% de déformation corrigée du facteur de Taylor $M = 0,3$.

La Fig. B-6 montre l'évolution de $\Delta G(\tau)$ en utilisant les ajustements les plus précis pour chacune des méthodes et matériaux considérés [Tableau B-5]. Nous considérons cependant qu'il existe trop d'inconnues pour établir une expression fiable à partir des données sur la bainite. Pour la suite de nos travaux, nous choisissons donc d'utiliser les résultats obtenus pour les monocristaux de fer, d'autant plus que le matériau simulé en dynamique des dislocations est la ferrite. Entre les deux ajustements restants, nous avons retenu celui effectué à l'aide de $d\tau_y/dT$ obtenu sans paramètres fixes, qui est celui utilisé pour les modèles à forte contrainte du Chapitre V [§V-2]. Un meilleur ajustement serait cependant possible en disposant d'un plus grand nombre de données expérimentales à proximité de T_{at} .

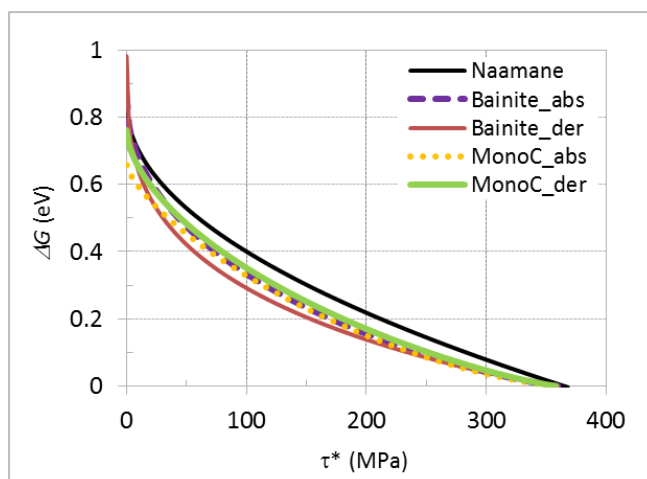


Fig. B-6 : Évolution de l'énergie d'activation avec la contrainte effective en utilisant les meilleurs ajustements par une loi de Kocks (B.1) obtenus pour la bainite et les monocristaux de fer à partir des mesures de τ_y (« abs ») et des valeurs de $d\tau_y/dT$ (« der »). Les valeurs des paramètres dans chaque cas sont recueillies dans le Tableau B-5.

Ajustement	Paramètres					Qualité	
	τ_p (MPa)	ΔH_0 (eV)	T_{at} (K)	p	q	R ²	SSE
Naamane	365	0,84	390	0,5	1	-	-
MonoC. [τ_y] - Tous	363 (275 – 451)	0,658	305 (290 – 321)	0,744 (0,54 – 0,95)	1,437 (0,75 – 2,16)	0,994	929,6
MonoC. [$d\tau_y/dT$] - Tous_mix	359 (315 – 403)	0,761	353 (151 – 556)	0,593 (0,21 – 0,97)	1,223 (0,99 – 1,46)	0,8725	1,133
Bainite [τ_y] - $\tau_p = 360$MPa	360	0,865	295 (292 – 298)	0,48 (0,44 – 0,52)	1,230 (1,12 – 1,33)	0,9939	2419
Bainite [$d\tau_y/dT$] - $\tau_p = 360$MPa	360	0,982	335	0,317 (0,27 – 0,37)	1,105 (1,02 – 1,19)	0,9038	2,822

Tableau B-5 : Résumé des meilleurs ajustements obtenus pour les monocristaux de fer et la bainite en utilisant les données de τ_y et $d\tau_y/dT$ [Fig. B-6]. Celui retenu pour la suite de ces travaux est signalé en vert [« MonoC. ($d\tau_y/dT$)- Tous_mix »]. Les valeurs obtenues par Naamane sur les monocristaux à partir de τ_y sont données pour comparaison.

B.6 Références

- CHAUSSIDON, J. 2007. *Etude multiéchelle de la plasticité du fer alpha à basse température*. Docteur de l'INP Grenoble Thesis (PH D), Grenoble INP - ED "Matériaux et Génie des Procédés".
- HIRTH, J. P. & LOTHE, J. 1982. Diffusive Glide and Climb Processes. *Theory of dislocations*. 2nd ed ed. New York ; Chichester: Wiley.
- KOCKS, U. F., ARGON, A. S. & ASHBY, M. F. 1975. Phenomenological Description of Glide Resistance Profiles. *Thermodynamics and kinetics of slip*. Oxford: Pergamon Press.
- KURAMOTO, E., AONO, Y. & KITAJIMA, K. 1979. THERMALLY ACTIVATED SLIP DEFORMATION OF HIGH-PURITY IRON SINGLE-CRYSTALS BETWEEN 4.2-K AND 300-K. *Scripta Metallurgica*, 13, 1039-1042.
- LIBERT, M. 2007. *Etudes expérimentale et numérique de l'effet des mécanismes de plasticité sur la rupture fragile par clivage dans les aciers faiblement alliés*. Docteur Thesis (PH D), Ecole Centrale de Paris.
- NAAMANE, S. 2008. *Etude de la déformation plastique de la ferrite à basse température: simulations de dynamique des dislocations*. Docteur de l'Université Pierre et Marie Curie Thesis (PH D), Université Pierre et Marie Curie.
- QUESNEL, D. J., SATO, A. & MESHII, M. 1975. SOLUTION SOFTENING AND HARDENING IN IRON-CARBON SYSTEM. *Materials Science and Engineering*, 18, 199-208.
- SPITZIG, W. A. 1973. EFFECTS OF ORIENTATION, TEMPERATURE AND STRAIN RATE ON DEFORMATION OF FE-0.16 WT PERCENT TI SINGLE-CRYSTALS. *Materials Science and Engineering*, 12, 191-202.
- SPITZIG, W. A. & KEH, A. S. 1970a. EFFECT OF ORIENTATION AND TEMPERATURE ON PLASTIC FLOW PROPERTIES OF IRON SINGLE CRYSTALS. *Acta Metallurgica*, 18, 611-&.

C. Remise à niveau de Tridis CC

Table des matières

C. Remise à niveau de Tridis CC	213
C.1 Introduction	213
C.2 Commentaires et explication des structures complexes	214
C.3 Entêtes explicatives aux routines	214
C.4 Déclaration explicite des variables	216
C.5 Amélioration de la structure d'initialisation.....	217
C.6 L'apport de flexibilité d'utilisation.....	218
C.7 Références.....	219

C.1 Introduction

En ce qui concerne le code Tridis CC, notre premier objectif lors de ces travaux de thèse a été de le rendre plus compréhensible et fiable sans pour autant changer ses fonctionnalités. Cette tâche, a surtout porté sur les points suivants :

- L'ajout de commentaires et explication des structures de données complexes [§C.2].
- L'ajout d'un entête explicatif dans la quasi-totalité des routines [§C.3].
- Une déclaration explicite des variables, *i.e.* passage en « *implicit none* » [§C.4].
- L'amélioration de la structure d'initialisation [§C.5].
- L'apport de flexibilité d'utilisation au code [§]

Au cours de ce processus nous avons corrigé de nombreuses erreurs existantes dans le code, concernant des aspects tels que :

- La sauvegarde de l'état d'une simulation et des fichiers de sortie, qui permet de reprendre tout calcul à l'identique. Ceci peut s'avérer très utile pour des longues simulations, mais c'est surtout essentiel pour le débogage et développement du code en soit, car cela permet de reproduire et étudier les erreurs éventuelles.
- La sur-écriture de variables d'entrée dans les routines du code, ce qui le rendait insensible aux choix de l'utilisateur final.

Une attention toute particulière a été aussi accordée à des aspects structurels tels que la segmentation de routines et fichiers devenus trop vastes en extension et fonctionnalité. Nous ne nous attarderons pas davantage sur ce point, mais citons à titre d'exemple :

- la boucle d'asservissement, au préalable intégrée au sein du programme principal, mais désormais dans une routine séparée.
- les routines nécessaires aux opérations tensorielles utilisées dans le code, auparavant éparpillées dans différents fichiers, mais désormais regroupées dans un même fichier « `math.f` » sous une forme unique utilisable par toutes les autres routines du code.

Comme on l'a vu dans le Chapitre IV, cet exercice de compréhension globale de Tridis CC a aussi permis de réduire de nombreuses redondances et calculs non nécessaires, dont l'origine fût sûrement la modification successive des routines par différentes personnes n'ayant pas une vision claire de l'ensemble. Ceci a non seulement eu un impact non négligeable sur ses performances [§IV-3.4], mais a aussi rendu possible la détection de certaines lacunes du code de calcul en soit [§IV-2].

C.2 Commentaires et explication des structures complexes

Un effort significatif a tout d'abord été réalisé sur la mise en place de commentaires afin d'expliquer, dans le code, des structures ou des algorithmes parfois complexes. Cet effort était d'autant plus important que le code était un peu avare d'explications et de commentaires.

Parmi les structures de données relativement complexes on retrouve les tableaux de pointeurs, que nous avons pris soin de détailler dans le code. A titre d'exemple, La Fig. C-1 montre la structure du tableau de pointeurs ISBOX mis au point par Shin (2004) lors de ses travaux de thèse. Dans Tridis, on découpe l'espace de simulation en boîtes pour accélérer le calcul de la contrainte interne, et ISBOX sert précisément à repérer les segments de dislocation dans chacune des boîtes au cours d'une simulation. Pour avoir plus des détails sur les motivations derrière ce découpage en boîtes, voir la section du manuscrit dédiée à « une nouvelle méthode des boîtes » [§IV-3.3].

ISBOX (is/ib, 1:2), initialisée dans la routine Binit du fichier Bbox.f

	Position	Contenu	
is	is_1^1	is_2^1	0
	is_2^1	is_3^1	is_1^1
	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
	is_n^1	ib_1	is_{n-1}^1
	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
ib	$is_m^{nboxes^3}$	ib_{nboxes^3}	$is_{m-1}^{nboxes^3}$
	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
	ITAB		
	ib_1	-	is_n^1
	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$

Indexé par les identifiants de boîte (ib) et segment (is)

- is [1:nseg], nseg<ITAB]
- ib [ITAB+1 : ITAB+nboxes3]
 - nseg : nombre de segments dans la simulation
 - ITAB : nombre de segments maximal admis
 - nboxes³ : nombre de boîtes dans la simulation

Taille totale [ITAB+nboxes³, 2]

Dans le diagramme ci-joint :

- is_i^k : identifiant du i -ième segment de la boîte k .
- ib_k : identifiant de la boîte k

Pour chaque segment dont l'identifiant est « is ».

- ISBOX ($is, 2$) $\equiv is$ du segment précédant dans la boîte
- ISBOX ($is, 1$) $\equiv is$ du segment suivant dans la boîte

Dans chaque boîte k avec l segments :

- ISBOX ($ib_k, 2$) $\equiv is_l^k$: dernier segment de la boîte
- ISBOX ($is_l^k, 1$) $\equiv ib_k$: identifiant de la boîte
- ISBOX ($is_1^k, 2$) $\equiv 0$: marque le premier segment

Fig. C-1 : Exemple de structure de données dans le code Tridis-CC. Dans Tridis on découpe l'espace de simulation en boîtes pour accélérer le calcul des contraintes internes (voir la section sur la « méthode des boîtes » [§IV-3.3]). ISBOX s'utilise pour repérer à chaque pas de temps tous les segments présents sur chacune de ces boîtes.

En tout, et bien que ce ne soit qu'une mesure grossière puisqu'elle ne tiens pas compte des commentaires en fin de ligne (très utilisés au cours de cette thèse), le logiciel libre CLOC (*Count Lines Of Code*) détecte 7960 lignes de commentaires pour 10233 lignes de code dans la dernière version du code, contre 4435 lignes commentées pour 8055 lignes de code auparavant.

C.3 Entêtes explicatives aux routines

La maîtrise d'un code de calcul passe tout d'abord par la compréhension des fonctions remplies par les différentes briques ou routines autour desquelles il s'articule. Dans les versions préalables de Tridis CC cependant, il n'y avait que peu de routines fournissant une information claire à propos de la tâche qu'elles accomplissent. Ainsi, dans le but de faciliter cette compréhension les informations suivantes ont été ajoutées dans entêtes :

- Pour chaque fichier, on a rajouté :
 - o la liste des routines qu'il contient.
- Pour chaque routine, on a rajouté :
 - o la liste des routines qui l'appellent,
 - o l'opération réalisée,
 - o les variables d'entrée et/ou sortie locales,
 - o les variables d'entrée et/ou sortie globales.
 - o une description plus détaillée de l'algorithme pour les plus complexes,

La Fig. C-2 montre un exemple de cette démarche pour une des routines clés du code, `onestep`, qui gère le mouvement des segments de dislocation après avoir calculé les contraintes résolues sur chacun d'entre eux. Ce travail a été d'autant plus ardu que, comme on le verra par la suite, un grand nombre de variables n'étaient pas déclarées, d'autres déclarées mais jamais utilisées.

a)

```

c*****|
c ONESTEP                                [ Appelee par main.f ]
c
c one updating event
c L is the block size
c*****|
      subroutine onestep(L,nsegm,ipask,kvistot,kcointot,nindex)

```

b)

```

c*****|
c ONESTEP
c
c      CALLED
c      - Main.f
c
c      CALLS
c      - obstacle
c      - CLboundary
c      - movesegment
c      - sort
c      - multiplobst
c      - dealobstacle2
c      - chequeneighb2
c
c      PURPOSE
c      - Computes one updating event (segment movement)
c
c      INPUT
c      - iStp      : current step (for edge/screw movement timing)
c      - kcointot  : total number of edge segments <- calc. at BCCES()
c      - kvistot   : total number of screw segments <- calc. at BCCES()
c      - iVar      : dummy var to propagate an integer across routines
c
c      INPUT/OUTPUT:
c      - nsegm     : total number of segments
c
c      OUTPUT (common)
c      - JUNCT(i)   | AVEC (i)
c      - ISEG (i,j) | INEIGHB (i,j)
c      - rstress (i,j) | time (i)
c      - residu (i)
c      - xLannihil (i)
c
c      APPROACH
c      1. Compute fly_dist and find possible obstacles (segments)
c      2. Check if there is a facet before closest obstacle
c      3. Deal with obstacles and move segment accordingly
c         - movement, annihilation, recombination, jonctions, devie,
c      4. Error check after movement (only when debug) [...]
c
c*****|
      subroutine onestep(nsegm,iStp,kcointot,kvistot,iVar)

```

Fig. C-2 : Exemple de commentaires sur une entête du code Tridis CC : **a)** version précédente ; **b)** dernière version

C.4 Déclaration explicite des variables

Comme nombreux codes de simulation physique, Tridis a été développé dans le langage de programmation Fortran (« *FORmula TRANslation* »), dont la première version fut développée dans les années 50 par IBM. Son origine étant très étroitement lié aux besoins de calcul scientifique, par rapport à d'autres langages plus récents comme le C, la version de Fortran qu'utilise Tridis CC (Fortran77) a l'avantage d'être très simple d'un point de vue de la programmation. Ceci se traduit par une très grande flexibilité dans la déclaration de variables, fonctions, et ses dépendances mutuelles, tout en restant suffisamment efficace pour ne pas compromettre les performances. Cette flexibilité, qui permet de coder des algorithmes très facilement, peut cependant devenir un inconvénient au fur et à mesure qu'un code de calcul se complexifie, et la programmation de Tridis en est un bon exemple.

Dans la plupart des langages de programmation, chaque variable doit être déclarée (comme un entier, un réel, une valeur logique, *etc.*) et initialisée avant d'être utilisée dans une routine. Cette étape permet d'identifier facilement toutes les variables et grandeurs mises en jeu dans chaque partie du code. Or, le langage Fortran77 a ce qu'on appelle des « règles implicites » pour la déclaration de variables, ce qui permet d'introduire des nouvelles à tout moment dans le code, sans qu'elles aient été déclarées au préalable.

Cela ne pose pas de problème pour un code de taille réduite avec des fonctions simples, mais peut rapidement le devenir lorsque plusieurs utilisateurs modifient des routines complexes. La déclaration implicite devient alors un grand handicap (Tridis CC a plus de 9000 lignes de code, commentaires non-inclus).

a)

```
subroutine obstaclesearch(is,ii,IL,BOOL,
                        immo,COPLA,SOURCE,DEVIE,idistt,idistg,nsegm,L)
[...]
logical BOOL,COPLA,SOURCE,DEVIE,immo
logical iistart,iiend
logical bool2
dimension n(3),iS1S2(3),iS1E2(3),it1(3),ig(3),it2(3)
```

b)

```
subroutine obstaclesearch (is,ii,IL,nsegm,BOOL,CUTIS
                        ,immo,COPLA,SOURCE,DEVIE,idistt,idistE,itCut,idistg,iVar)
[...]
c  Input variables declaration -----|
integer is,ii,IL,iVar

c  Input/Output variables declaration -----|
integer nsegm

c  Output variables declaration -----|
logical BOOL,CUTIS,immo,COPLA,SOURCE,DEVIE
integer idistt,idistg,idistE,itCut

c  Local variables declaration -----|
integer L1,idt,idg,ibis,L2,idt2,idg2,ibii
      ,iS1S2(3),n(3),it1(3),it2(3),nt2,nS1S2,idif
      ,ig(3),igg,igt2,igr,ipg,iil,itt,itt2,itr,ipt,illm,ilambda
      ,isi,iL1,is2,ie2
      ,ilr,iS1E2(3),igr2,l22,iprev,iprev2,inext,inext2
      ,idtp2,idtn2,iaux

logical taken                      ! for 3D jonction case
logical iistart,iiend              ! for coplanar_orthogonal case
double precision xigr,xigr2        ! for coplanar_orthogonal case
integer i                          ! dummy var for loops index
```

Fig. C-3 : Exemple de déclaration des variables sur une routine du code Tridis CC : **a)** version précédente avec déclaration implicite : la majorité des variables ne sont pas déclarées ; bool2 est déclarée mais pas utilisée ; **b)** dernière version : déclaration explicite de toutes les variables

Dans ces travaux nous avons réalisé un effort d'identification systématique des variables dans chaque routine, ce qui a permis de « nettoyer » le code. Ainsi, plus d'une centaine de variables non utilisées ont été effacées, et 104 parmi les 107 routines actives dans Tridis CC sont maintenant en mode « *implicit none* », contre zéro auparavant. Ceci veut dire que toutes les variables de la routine sont déclarées dès le départ, et que la déclaration implicite n'est pas tolérée pour les futures modifications, ce qui contribuera à garder un code lisible pour les prochains utilisateurs. De plus, une attention particulière a été accordée à la cohérence globale des noms de variables, utilisant les mêmes noms pour appeler les mêmes entités dans la majorité des routines du code (contre une dénomination très variable au préalable).

C.5 Amélioration de la structure d'initialisation.

La lisibilité des routines d'initialisation d'un code est essentielle pour assurer une utilisation adéquate. Toute confusion à ce niveau peut en effet engendrer une perte de temps considérable en termes de débogage pour l'utilisateur final.

En ce qui concerne Tridis, la structure originale comportait deux routines : une pour charger les paramètres d'entrée de la simulation (`load`), et une autre pour initialiser les vecteurs de ligne et Burgers considérés dans le système (`initVec`). Cette structure a progressivement été rendue obscure à mesure que des nouvelles fonctionnalités ont été rajoutées au code. Le résultat est une initialisation assez complexe, avec parfois des initialisations croisées et contradictoires, qui s'enchevêtrent dans le code sans que l'utilisateur s'en aperçoive.

Nous avons ainsi modifié la structure de l'initialisation de Tridis, afin de la rendre plus claire. Comme le montre la Fig. C-4, la nouvelle version se caractérise par une structure avec :

- Une routine « **mère** », appelée dans le programme principal (`main`), qui est chargée de toute l'initialisation. Vu de `main`, toute l'initialisation se fait désormais via l'appel à une routine unique, ce qui améliore la lisibilité du programme.
- Des routines « **filles** » qui gèrent l'initialisation de paramètres spécifiques, et une fonction « *other* » pour rassembler les cas simples.
 - o `initConst` : initialise toutes les constantes de type mathématique utilisées dans le code (le chiffre Pi, $\sqrt{3}$, *etc.*)
 - o `initSeg3D` : initialise le volume de simulation, contrainte appliquée, et la disposition initiale des dislocations à partir des données du fichier `SEG3D`.
 - o `initControl` : initialise tous les paramètres de contrôle du code (Température, vitesse de déformation, *etc.*) à partir du fichier `CONTROL`.
 - o `initFacet` : initialise les « facettes », délimitées par des « nœuds » et définissant, entre autres, des « domaines » à l'intérieur de l'espace de simulation. Ces facettes étant parfois franchissables, une contrainte critique (`To Crit`) leur est associée. Chacune de ces informations se trouvant dans un fichier d'entrée différent, des sous-routines spécifiques les prennent en charge séparément.
 - o `initVec` : reprend sa fonction originale (initialisation des vecteurs de la base du système), nettoyée de tout le reste.
 - o `initPenny` : permet de traiter le cas d'une cavité dans la simulation.

Un dernier point sur la structure d'initialisation concerne la création (lors d'une nouvelle simulation) ou ouverture (lors d'une reprise d'une vieille simulation) des fichiers de données de sortie. Dans Tridis, ceux-ci étaient initialisés de manière dispersée (dans différentes routines) ce qui entraînait d'une part une difficulté à suivre les fichiers réellement utilisés, et d'autre part des erreurs d'initialisation (certains fichiers grandissaient sans cesse car jamais remis à zéro) et reprise (certains fichiers étaient écrasés lors d'une reprise de simulation).

Désormais, la routine `initOut()` reprend l'initialisation de la totalité des fichiers de sortie actifs à Tridis CC, tout en détaillant à chaque fois le contenu du fichier avec une entête claire, et ce en précisant la routine du code qui écrit dans chacun d'entre eux.

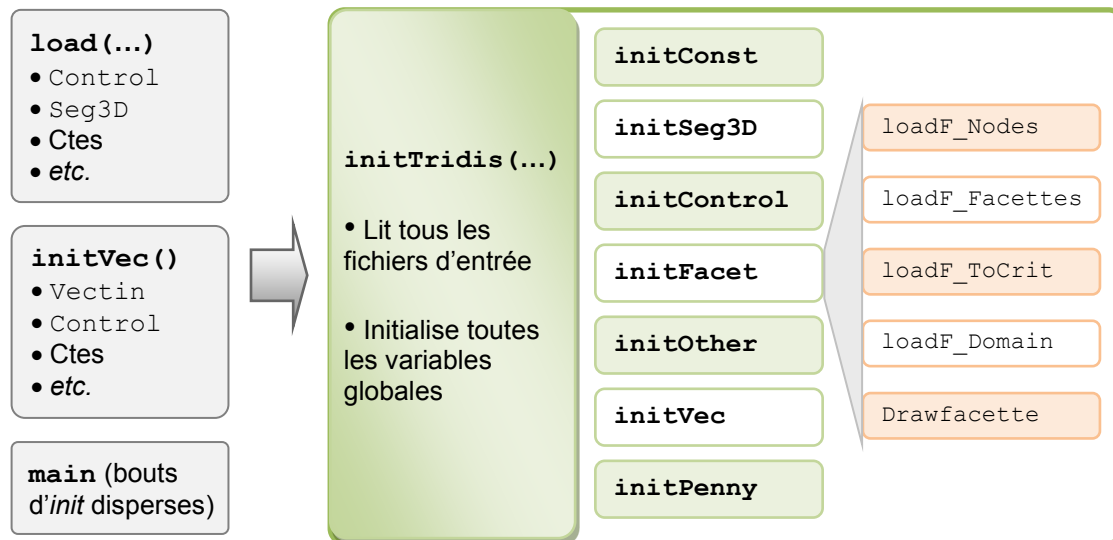


Fig. C-4 : Modification de la structure d'initialisation de Tridis. On est passé d'une structure avec une initialisation dispersée sur plusieurs routines à une structure avec une routine mère qui regroupe l'ensemble des initialisations réalisées en détail par des routines filles spécifiques.

C.6 L'apport de flexibilité d'utilisation

Comme dans tout code en développement, avant de lancer une simulation avec Tridis CC il faut faire un certain nombre de choix de configuration, dont certains relèvent de la physique du problème, et d'autres des algorithmes internes et les limitations intrinsèques au code. De fait, le nombre de choix augmente à chaque fois qu'une nouvelle fonctionnalité ou caractéristique est ajoutée, parfois en remplacement d'une version antérieure.

De manière générale, dans la version de Tridis en début de thèse, nombreux de ces choix étaient directement fixés dans les sources du code, ce qui nécessitait sa modification et la recompilation du code à chaque fois. Cette pratique n'est pas seulement encombrante, mais constitue aussi une source potentielle d'erreurs et de pertes de fonctionnalités. En effet, il n'est pas toujours aisé pour l'utilisateur final de connaître les détails de l'implémentation d'une certaine fonction dans le code, qu'il risque de modifier à tort.

Dans cette logique, nous avons essayé de faire de Tridis un outil aussi flexible que possible, en intégrant des paramètres d'entrée qui permettent de mieux adapter le code aux besoins de chaque simulation sans avoir à modifier les sources du programme. Ainsi, tous les apports principaux réalisés lors de cette thèse demeurent un choix pour l'utilisateur, qui pourra décider par exemple entre :

- Trois lois de vitesse de dislocations vis différentes qui correspondent aux deux relations décrites dans le Chapitre V, plus celle développée par Chaussidon [§III-3.6], qui reste opérationnelle dans le code. Chacune peut être utilisée avec ou sans le terme entropique proposé dans §V-3.
- L'utilisation du « mouvement continu », qui permet d'avoir des dislocations qui avancent à une vitesse inférieure à une unité du réseau discret par pas de temps de simulation (autrement elles resteraient immobiles). Cette caractéristique peut être particulièrement utile dans certaines simulations gérant des différences de mobilité très fortes entre dislocations, mais peut aussi être une source importante d'instabilités dans certains cas. Nous nous en sommes par exemple servis dans les simulations de traction simple et sauts de vitesse du Chapitre V [§V-3.5.2].

- Trois algorithmes de calcul de la contrainte interne à longue portée, à précession et coûts en temps de calcul variables, dont la méthode des boîtes existante à Tridis [§IV-3.3.1] et la nouvelle méthode proposée dans le Chapitre IV [§IV-3.3.2]
- La possibilité de réaliser des sauts de vitesse de déformation ou température en cours de simulation, en définissant l'amplitude et la durée (en déformation) des changements.

Par ailleurs, nous avons rendu accessibles un certain nombre de choix qui étaient déjà fixés dans Tridis. Désormais, à présent pour toute simulation il est possible choisir :

- Le niveau de glissement dévié accepté parmi ceux envisagés par Shigesato (2007) et Chaussidon (2007), soit : pas de glissement dévié, glissement dévié uniquement sur les plans de cisssion résolue maximale, et la possibilité de glissement secondaire dans les régions de maillage ou maillage et anti-maillage [§IV-2.4, §V-4.1].
- Les paramètres pouvant avoir un impact significatif sur le temps de simulation, tels que la vérification d'erreurs de recouvrement de segments [§IV-2.2] et le niveau de discrétisation dans les domaines dits « virtuels ».
- Le paramètres pouvant avoir un impact significatif sur la stabilité des simulations, tels que la distance minimale entre segments répulsifs [§IV-2.5.2.3] ou la vitesse maximale admise.

C.7 Références

- CHAUSSIDON, J. 2007. *Etude multiéchelle de la plasticité du fer alpha à basse température*. Docteur de l'INP Grenoble Thesis (PH D), Grenoble INP - ED "Matériaux et Génie des Procédés".
- SHIGESATO, G. 2007. *Development of dislocation structures in steels: Relation with the mechanical properties*. Docteur de l'INP Grenoble Thesis (PH D), Grenoble INP - ED "Matériaux et Génie des Procédés".
- SHIN, C. 2004. *3D Discrete Dislocation Dynamics applied to dislocation-precipitate interactions*. Docteur de l'INP Grenoble Thesis (PH D), Grenoble INP - ED "Matériaux et Génie des Procédés".

D. Évolution de la contrainte interne (détail)

Évolution de la contrainte interne dans chacun des 50 points mesurés sur une latte de ferrite en flexion dans les conditions détaillées dans le Chapitre V [§V-4.2].

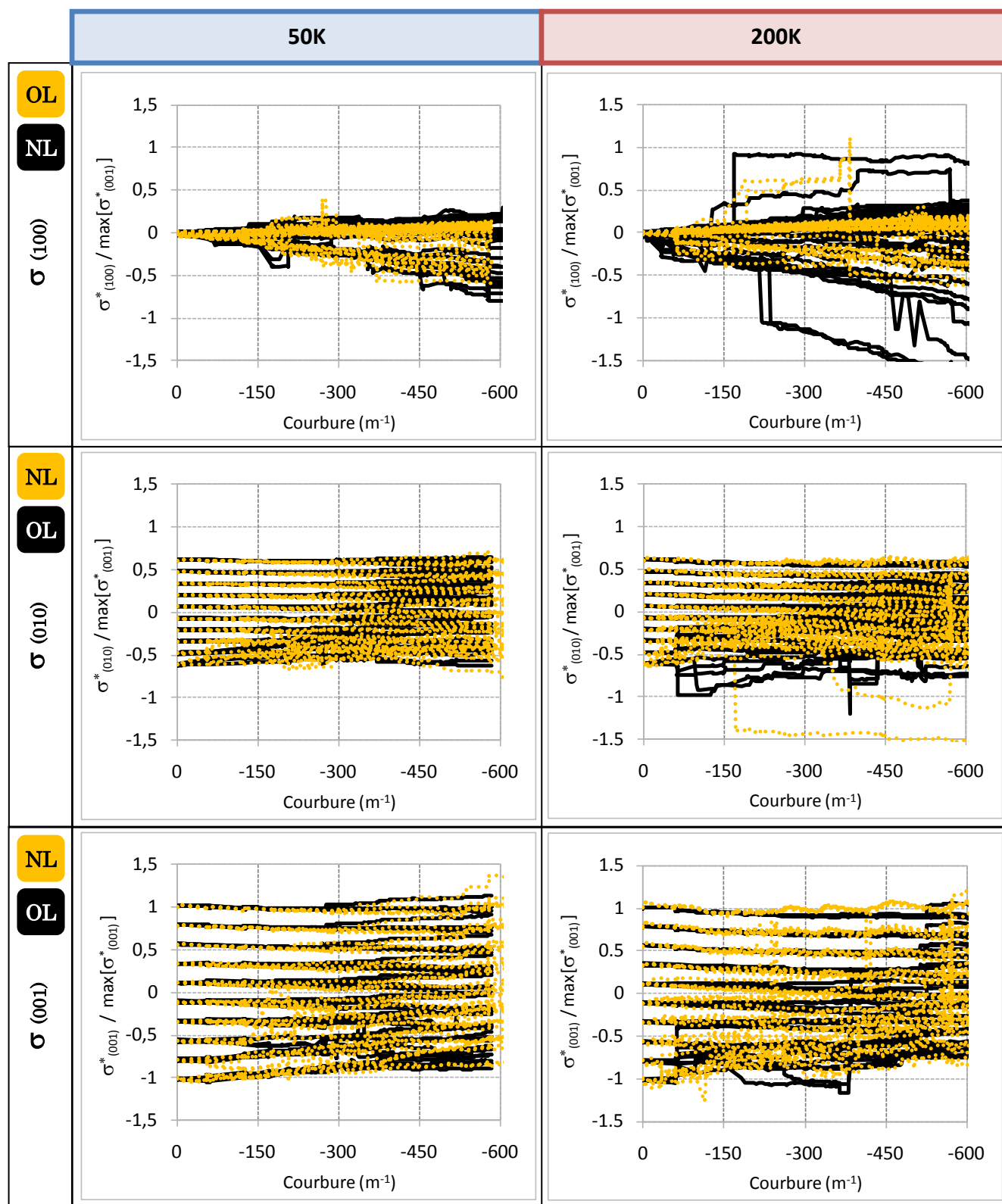
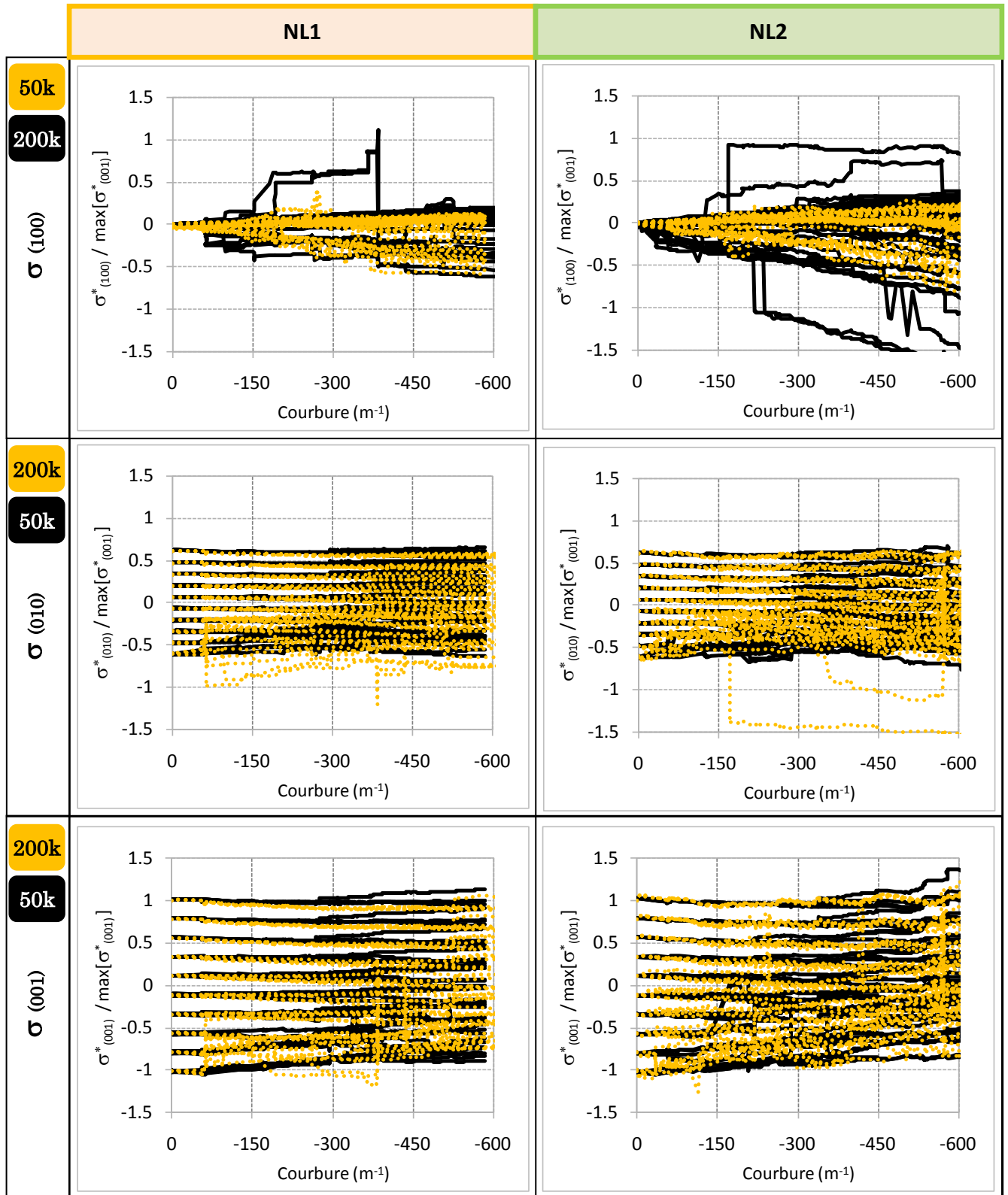


Fig. D-1 : Évolutions en fonctions de la courbure en flexion de la latte de la contrainte résolue (σ^*) sur les plans de clivage (001) et (100), à 50K et 200K, avec la loi de mobilité des vis qui intègre un terme entropique (NL2) et celle qui n'en a pas (NL1). Nous comparons l'influence de la loi de mobilité pour chaque température.



b)

Fig. D-2 : Évolutions en fonctions de la courbure en flexion de la latte de la contrainte résolue (σ^*) sur les plans de clivage (001) et (100), à 50K et 200K, avec la loi de mobilité des vis qui intègre un terme entropique (NL2) et celle qui n'en a pas (NL1). Nous comparons ici le changement avec la température pour chacune des deux lois de mobilité.

E. Champ de contrainte d'un segment de dislocation à longue distance

Nous détaillons ici l'expression du champ de contrainte à longue portée pour un segment de dislocation tel qu'indiqué par l'équation (4.4) dans le repère de Li [§IV-3.3.2.1], que nous rappelons ici :

$$\sigma_{ij}(r) = L \frac{\partial \sigma_{ij}^{Li}}{\partial z}(r) \quad (\text{E.1})$$

Où :

- $\sigma_{ij}(r)$: champ de contrainte créée par le segment de longueur L au point $\mathbf{r}$.
- $\sigma_{ij}^{Li}(r)$: champ de contrainte créée par un segment semi-infini.

Nous en déduisons le champ de contrainte à longue distance (et au premier ordre en L/R) d'un segment de dislocation de longueur L situé sur l'axe z à partir du point O [Fig. IV-13]. Nous obtenons ainsi :

$$\begin{aligned} \sigma_{xx} &= \frac{L}{r^2} \left(-b_y \frac{x}{r} - b_x \frac{y}{r} + 3 \left(\frac{x}{r} \right)^2 \left(b_y \frac{x}{r} - b_x \frac{y}{r} \right) \right) \\ \sigma_{yy} &= \frac{L}{r^2} \left(b_y \frac{x}{r} + b_x \frac{y}{r} + 3 \left(\frac{y}{r} \right)^2 \left(b_y \frac{x}{r} - b_x \frac{y}{r} \right) \right) \\ \sigma_{zz} &= \frac{L}{r^2} \left(-1 + 2\nu + 3 \left(\frac{z}{r} \right)^2 \right) \left(b_y \frac{x}{r} - b_x \frac{y}{r} \right) \\ \sigma_{yz} &= \frac{L}{r^2} \left(b_z (1-\nu) \frac{x}{r} + b_x \nu \frac{z}{r} + 3 \frac{y}{r} \frac{z}{r} \left(b_y \frac{x}{r} - b_x \frac{y}{r} \right) \right) \\ \sigma_{xz} &= \frac{L}{r^2} \left(-b_z (1-\nu) \frac{y}{r} - b_y \nu \frac{z}{r} + 3 \frac{x}{r} \frac{z}{r} \left(b_y \frac{x}{r} - b_x \frac{y}{r} \right) \right) \\ \sigma_{xy} &= \frac{L}{r^2} \left(-b_y \frac{y}{r} + b_x \frac{x}{r} + 3 \frac{x}{r} \frac{y}{r} \left(b_y \frac{x}{r} - b_x \frac{y}{r} \right) \right) \end{aligned} \quad (\text{E.2})$$

Comme nous l'avons noté dans le corps du manuscrit, ce champ élastique se caractérise par :

- une dépendance en $1/r^2$ (et non $1/r$ comme pour un segment semi-infini),
- une linéarité en L ,
- une absence de divergence dans l'axe « positif » du segment.

F. Valeurs numériques pour le calcul des coefficients de friction visqueuse

Symbole	Signification	Expression utilisée	Fer CC	
			Vis	Coin
a	Paramètre de maille	-	2,87 Å	
b	Module du vecteur de burgers	-	2,54 Å	
θ	Température de Debye	$\frac{hc}{2k_B} \left(\frac{6N}{a^3 \pi} \right)^{1/3}$	420 K	
τ_p	Contrainte de Peierls	-	1,1 GPa (Shimizu <i>et al.</i> , 2007)	25 – 90 MPa (Terentyev <i>et al.</i> , 2008)
μ	Module de cisaillement	-	81 GPa (Seeger and Buck, 1960)	
n	Module de Murnaghan	-	1490 GPa (Seeger and Buck, 1960)	
c	Vitesse des ondes transverses	$\sqrt{\frac{\mu}{\rho}}$	3207 m/s	
k_D	Nombre d'onde maximum dans le spectre de Debye	$\left(\frac{6N\pi^2}{a^3} \right)^{1/3}$	$1,36 \cdot 10^{10} \text{ m}^{-1}$	
N	Nombre d'atomes par maille	-	2	
r_o	Rayon du cœur de la dislocation	-	3 Å (Clouet <i>et al.</i> 2009)	8.6 Å (=3a)
β_o	Paramètre adimensionnel	$2r_o k_D$	10,3	29,5
Δ	Paramètre adimensionnel	(exp)	0.6	
λ_θ	Paramètre adimensionnel	(1.32)	0.074	

Bibliographie générale

- ACKLAND, G. J., BACON, D. J., CALDER, A. F. & HARRY, T. 1997. Computer simulation of point defect properties in dilute Fe-Cu alloy using a many-body interatomic potential. *Philosophical Magazine a-Physics of Condensed Matter Structure Defects and Mechanical Properties*, 75, 713-732.
- ACKLAND, G. J., MENDELEV, M. I., SROLOVITZ, D. J., HAN, S. & BARASHEV, A. V. 2004. Development of an interatomic potential for phosphorus impurities in alpha-iron. *Journal of Physics-Condensed Matter*, 16, S2629-S2642.
- AFCEN 2007. Règles de conception et de construction des matériels mécaniques des îlots nucléaires REP (RCC-M). *Tome II - Matériaux 1ère partie*. Paris: AFNOR.
- ALSHITS, V. I. 1970. PHONON-WIND AND DISLOCATION DAMPING. *Soviet Physics Solid State, Ussr*, 11, 1947-&.
- ALSHITS, V. I. & INDENBOM, V. L. 1986. Mechanisms of Dislocation Drag. In: NABARRO, F. R. N. (ed.) *Dislocations in solids. Volume 7*. Amsterdam ; Oxford: North-Holland.
- ALSHITS, V. I. & MALSHUKO, A. G. 1972. PHONON COMPONENT OF DYNAMIC DRAG OF DISLOCATIONS. *Zhurnal Eksperimentalnoi I Teoreticheskoi Fiziki*, 63, 1849-&.
- ALSHITS, V. I. & SANDLER, Y. M. 1974. FLUTTER MECHANISM OF DISLOCATION DRAG. *Physica Status Solidi B-Basic Research*, 64, K45-K49.
- ANDRONOV, V. M., PETCHENKO, A. M. & STARTSEV, V. I. 1975. TEMPERATURE-DEPENDENCE OF DISLOCATION DRAG CONSTANT IN POTASSIUM-CHLORIDE AT TEMPERATURES FROM 77 DEGREES TO 413 DEGREES K. *Soviet Physics Acoustics-Ussr*, 21, 314-317.
- ARSENAULT, R. J. 1964. LOW-TEMPERATURE CREEP OF ALPHA IRON. *Acta Metallurgica*, 12, 547-&.
- ATKINSON, W. & CABRERA, N. 1965. MOTION OF A FRENKEL-KONTOROWA DISLOCATION IN A 1-DIMENSIONAL CRYSTAL. *Physical Review*, 138, A763-&.
- BACON, D. J., CALDER, A. F., HARDER, J. M. & WOODING, S. J. Year. COMPUTER-SIMULATION OF LOW-ENERGY DISPLACEMENT EVENTS IN PURE BCC AND HCP METALS. In, 1993. Elsevier Science Bv, 52-58.
- BACON, D. J. & DELARUBIA, T. D. 1994. MOLECULAR-DYNAMICS COMPUTER-SIMULATIONS OF DISPLACEMENT CASCADES IN METALS. *Journal of Nuclear Materials*, 216, 275-290.
- BACON, D. J., GAO, F. & OSETSKY, Y. N. 2000. The primary damage state in fcc, bcc and hcp metals as seen in molecular dynamics simulations. *Journal of Nuclear Materials*, 276, 1-12.
- BACON, D. J., KOCKS, U. F. & SCATTERGOOD, R. 1973. EFFECT OF DISLOCATION SELF-INTERACTION ON OROWAN STRESS. *Philosophical Magazine*, 28, 1241-1263.
- BACON, D. J. & OSETSKY, Y. N. 2007. The atomic-scale modeling of dislocation-obstacle interactions in irradiated metals. *Jom*, 59, 40-45.
- BACON, D. J., OSETSKY, Y. N. & RONG, Z. 2006. Computer simulation of reactions between an edge dislocation and glissile self-interstitial clusters in iron. *Philosophical Magazine*, 86, 3921-3936.
- BACON, D. J., OSETSKY, Y. N., STOLLER, R. & VOSKOBOINIKOV, R. E. 2003. MD description of damage production in displacement cascades in copper and alpha-iron. *Journal of Nuclear Materials*, 323, 152-162.
- BARASHEV, A. V., GOLUBOV, S. I., BACON, D. J., FLEWITT, P. E. J. & LEWIS, T. A. 2004. Copper precipitation in Fe-Cu alloys under electron and neutron irradiation. *Acta Materialia*, 52, 877-886.
- BARRALIS, J. & MAEDER, G. 1997. *Métallurgie : élaboration, structures-propriétés, normalisation*, Paris, AFNOR / Nathan.
- BASINSKI, Z. S. & JACKSON, P. J. 1965. INSTABILITY OF WORK HARDENED STATE .2. SLIP IN ALIEN DISLOCATION DISTRIBUTIONS. *Physica Status Solidi*, 10, 45-&.
- BECQUART, C. S., DOMAIN, C., LEGRIS, A. & VAN DUYSSEN, J. C. 2000. Influence of the interatomic potentials on molecular dynamics simulations of displacement cascades. *Journal of Nuclear Materials*, 280, 73-85.
- BECQUART, C. S., DOMAIN, C., VAN DUYSSEN, J. C. & RAULOT, J. M. 2001. The role of Cu in displacement cascades examined by molecular dynamics. *Journal of Nuclear Materials*, 294, 274-287.

- BENHAMOU, C., DUNAND-ROUX, L., JOBARD, D., MASSOUD, J.-P. & POITRAULT, I. Year. Cuves des REP : Choix et évolution des matériaux et des fabrications. *In*: Évolution du choix des matériaux : Petites et grandes histoires, 25/11/2008 2008 Paris.
- BENHAMOU, C., LUU, L., REGER, M., RENAUT, P. & CHAMPIGNY, F. 2007. Improvements in the Metallurgical Quality of Large Forged Pieces : Case of EPR Nozzle Shell with Integral Flange. *Revue Générale du Nucléaire (RGN)*, 6, 72-79.
- BERGNER, F., ULBRICHT, A., GOKHMAN, A. & ERAK, D. 2008. Nature of defect clusters in neutron-irradiated iron-based alloys deduced from small-angle neutron scattering. *Journal of Nuclear Materials*, 373, 199-205.
- BERLINER, B. 1990. CVS II: parallelizing software development. *Proceedings of the Winter 1990 USENIX Conference / Proceedings of the Winter 1990 USENIX Conference*, 341-52 | xvi+374.
- BETHMONT, M. 1988. Évolution de la ténacité dans l'épaisseur des viroles de cuves des réacteurs à eau (1ere partie): essais de caractérisation chimique, métallurgique et mécanique sur deux viroles B des cuves Q3 et Q12. Morêt-sur-Loing: EDF.
- BOCQUET, P., BUISINE, D. & DUNAND-ROUX, L. 1994. Les facteurs métallurgiques de la ténacité de l'acier de cuve. Morêt-sur-Loing: EDF.
- BONDARENKO, A. I., SAVIN, M. M. & SUBBOTIN, A. V. 2005. Model of combined hardening of crystalline materials by coherent and incoherent precipitates in application to irradiated iron-based alloys with BCC structure. *Atomic Energy*, 98, 317-323.
- BOUCHET, C., TANGUY, B., BESSON, J. & BUGAT, S. 2005. Prediction of the effects of neutron irradiation on the Charpy ductile to brittle transition curve of an A508 pressure vessel steel. *Computational Materials Science*, 32, 294-300.
- BOUYNE, E. 1999. *Propagation et arrêt de fissure de clivage dans l'acier 2 1/4Cr-1Mo*. Docteur en Sciences et Génie des Matériaux Thesis (PH D), Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris.
- BRAILSFORD, A. D. 1970. PHONON COMPONENT OF DISLOCATION DRAG. *Journal of Applied Physics*, 41, 4439-&.
- BRUNNER, D. & DIEHL, J. 1997. The effect of atomic lattice defects on the softening phenomena of high-purity alpha-iron. *Physica Status Solidi A*, 160, 355-372.
- BULLOUGH, T. J., ENGLISH, C. A. & EYRE, B. L. 1991. LOW-ENERGY HEAVY-ION IRRADIATIONS OF COPPER AND MOLYBDENUM AT LOW-TEMPERATURES. *Proceedings of the Royal Society of London Series a-Mathematical Physical and Engineering Sciences*, 435, 85-107.
- BYUN, T. S. 2007. Dose dependence of true stress parameters in irradiated bcc, fcc, and hcp metals. *Journal of Nuclear Materials*, 361, 239-247.
- BYUN, T. S. & FARRELL, K. 2004. Plastic instability in polycrystalline metals after low temperature irradiation. *Acta Materialia*, 52, 1597-1608.
- BYUN, T. S., FARRELL, K. & LI, M. K. 2008. Deformation in metals after low-temperature irradiation: Part II - Irradiation hardening, strain hardening, and stress ratios. *Acta Materialia*, 56, 1056-1064.
- BYUN, T. S. & HASHIMOTO, N. 2006. Strain hardening and long-range internal stress in the localized deformation of irradiated polycrystalline metals. *Journal of Nuclear Materials*, 354, 123-130.
- CADIOU, L., COMON, J., DUNANDROUX, L., VASSAL, J. M. & HOUSSIN, B. 1977. METALLURGICAL DEVELOPMENT OF THICK FORGINGS IN LOW-ALLOY STEELS FOR NUCLEAR-REACTOR TANKS. *Revue De Metallurgie-Cahiers D Informations Techniques*, 74, 459-470.
- CAILLARD, D. 2009. TEM in situ straining experiments in Fe at low temperature. *Philosophical Magazine Letters*, 89, 517-526.
- CAILLARD, D. & COURET, A. 2002. Dislocation movements controlled by friction forces and local pinning in metals and alloys. *Materials Science and Engineering a-Structural Materials Properties Microstructure and Processing*, 322, 108-117.
- CAILLARD, D. & MARTIN, J. L. 2003a. Dislocation core structures and Peierls potentials. *Thermally activated mechanisms in crystal plasticity*. Oxford: Pergamon.
- CAILLARD, D. & MARTIN, J. L. 2003b. Kink-pair mechanism. *Thermally activated mechanisms in crystal plasticity*. Oxford: Pergamon.
- CAILLARD, D. & MARTIN, J. L. 2003c. Low temperature plasticity of BCC metals. *Thermally activated mechanisms in crystal plasticity*. Oxford: Pergamon.

- CAILLARD, D. & MARTIN, J. L. 2003d. Thermally activated core transformations. *Thermally activated mechanisms in crystal plasticity*. Oxford: Pergamon.
- CAILLARD, D. & MARTIN, J. L. 2003e. *Thermally activated mechanisms in crystal plasticity*, Oxford, Pergamon.
- CARASSOU, S. 1999. *Déclenchement du clivage dans un acier faiblement allié : Rôle de l'endommagement ductile localisé autour des inclusions*. Docteur en Sciences et Génie des Matériaux Thesis (PH D), Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris.
- CHAUSSIDON, J. 2007. *Etude multiéchelle de la plasticité du fer alpha à basse température*. Doctorat de l'INP Grenoble Thesis (PH D), Grenoble INP - ED "Matériaux et Génie des Procédés".
- CHAUSSIDON, J., FIVEL, M. & RODNEY, D. Year. The glide of screw dislocations in bcc Fe: Atomistic static and dynamic simulations. *In*, 2006. Pergamon-Elsevier Science Ltd, 3407-3416.
- CHAUSSIDON, J., ROBERTSON, C., FIVEL, M. & MARINI, B. 2010. Internal stress evolution in Fe laths deformed at low temperature analysed by dislocation dynamics simulations. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 18, 14.
- CHRISTIAN, J. W. 1983. SOME SURPRISING FEATURES OF THE PLASTIC-DEFORMATION OF BODY-CENTERED CUBIC METALS AND ALLOYS. *Metallurgical Transactions a-Physical Metallurgy and Materials Science*, 14, 1237-1256.
- CLOUET, E., GARRUCHET, S., NGUYEN, H., PEREZ, M. & BECQUART, C. S. 2008. Dislocation interaction with C in $[\alpha]$ -Fe: A comparison between atomic simulations and elasticity theory. *Acta Materialia*, 56, 3450-3460.
- CLOUET, E., VENTELON, L. & WILLAIME, F. 2009. Dislocation Core Energies and Core Fields from First Principles. *Physical Review Letters*, 102, 4.
- CONRAD, H., HAYS, L., SCHOECK, G. & WIEDERSICH, H. 1961. ON THE RATE-CONTROLLING MECHANISM FOR PLASTIC FLOW OF MG CRYSTALS AT LOW TEMPERATURES. *Acta Metallurgica*, 9, 367-378.
- CONRAD, H. & WIEDERSICH, H. 1960. ACTIVATION ENERGY FOR DEFORMATION OF METALS AT LOW TEMPERATURES. *Acta Metallurgica*, 8, 128-130.
- COTTRELL, A. H. & STOKES, R. J. 1955. EFFECTS OF TEMPERATURE ON THE PLASTIC PROPERTIES OF ALUMINIUM CRYSTALS. *Proceedings of the Royal Society of London Series a-Mathematical and Physical Sciences*, 233, 17-34.
- COULON, G., LECOQ, J. & ESCAIG, B. 1974. X-RAY DISLOCATION SUBSTRUCTURE OBSERVATIONS AND STRENGTHENING MECHANISMS IN ALPHA-IRON SINGLE-CRYSTAL BETWEEN ROOM-TEMPERATURE AND 123 K. *Journal De Physique*, 35, 557-569.
- COURET, A. & CAILLARD, D. 1989. PRISMATIC SLIP IN BERYLLIUM .1. THE CONTROLLING MECHANISM AT THE PEAK TEMPERATURE. *Philosophical Magazine a-Physics of Condensed Matter Structure Defects and Mechanical Properties*, 59, 783-800.
- COWLEY, J. M. & MOODIE, A. F. 1957. THE SCATTERING OF ELECTRONS BY ATOMS AND CRYSTALS .1. A NEW THEORETICAL APPROACH. *Acta Crystallographica*, 10, 609-619.
- CURRY, D. A. & KNOTT, J. F. 1978. Effects of microstructure on cleavage fracture stress in steel. *Metal Science*, 12, 511-514.
- DARINSKAYA, E. V., URUSOVSKAYA, A. A., ALSHITS, V. I., ALEKHIN, V. A. & SHEMYAKOVA, A. A. 1981. SOME PECULIARITIES OF DEFORMATION AT IMPULSIVE LOADING OF CSI CRYSTALS AND DYNAMICS OF INDIVIDUAL DISLOCATIONS. *Fizika Tverdogo Tela*, 23, 1751-1755.
- DARRIGRAND, E. 2002. *Couplage méthodes multipôles - discrétisation microlocale pour les équations intégrales de l'électromagnétisme*. Docteur Thesis (PH D), Université de Bordeaux I - ED "Mathématiques et informatique".
- DELAYE, J. M. & GHALEB, D. 1997. Molecular dynamics simulation of low-energy atomic displacement cascades in a simplified nuclear glass. *Journal of Nuclear Materials*, 244, 22-28.
- DIAWARA, B. 2007. Master Sciences - Physique Thesis (Master), Université Louis Pasteur de Strasbourg - EDF.
- DOMAIN, C., BECQUART, C. S. & MALERBA, L. 2004. Simulation of radiation damage in Fe alloys: an object kinetic Monte Carlo approach. *Journal of Nuclear Materials*, 335, 121-145.
- DOMAIN, C. & MONNET, G. 2005. Simulation of screw dislocation motion in iron by molecular dynamics simulations. *Physical Review Letters*, 95, 4.

- DORN, J. E. & RAJNAK, S. 1964. NUCLEATION OF KINK PAIRS + PEIERLS MECHANISM OF PLASTIC DEFORMATION. *Transactions of the Metallurgical Society of Aime*, 230, 1052-&.
- DUESBERRY, M. S. & HIRSCH, P. B. 1968. In: ROSENFELD, A. R., HAHN, G. T., BEMENT, A. L. & JAFFEE, R. I. (eds.) *Dislocation dynamics : [proceedings]*. New York ; London: McGraw-Hill.
- EASON, E. D., WRIGHT, J. E. & ODETTE, G. R. 1996. Improved Embrittlement Correlations for Reactor Pressure Vessel Steels. NUREG/CR-6551.
- EASON, E. D., WRIGHT, J. E. & ODETTE, G. R. 1998. Improved Embrittlement Correlations for Reactor Pressure Vessel Steels. NUREG/CR-6551.
- ELDRUP, M. & SINGH, B. N. 2000. Study of defect annealing behaviour in neutron irradiated Cu and Fe using positron annihilation and electrical conductivity. *Journal of Nuclear Materials*, 276, 269-277.
- ELDRUP, M., SINGH, B. N., ZINKLE, S. J., BYUN, T. S. & FARRELL, K. 2002. Dose dependence of defect accumulation in neutron irradiated copper and iron. *Journal of Nuclear Materials*, 307, 912-917.
- ENGLISH, C. A. & JENKINS, M. L. 1987. Insight into cascade processes arising from studies of cascade collapse. *Materials Science Forum*, 15-18, 1003-1022.
- ERGINSOY, C., ENGLERT, A. & VINEYARD, G. H. 1964. DYNAMICS OF RADIATION DAMAGE IN BODY-CENTERED CUBIC LATTICE. *Physical Review a-General Physics*, 133, A595-&.
- ESCAIG, B. 1968a. CROSS-SLIP OF SCREW DISLOCATIONS IN CUBIC STRUCTURE WITH CENTERED FACES. *Journal De Physique*, 29, 225-&.
- ESCAIG, B. 1968b. THERMAL ACTIVATION OF DEVIATIONS IN WEAK STRESSES IN BCC AND HCP STRUCTURES. *Physica Status Solidi*, 28, 463-&.
- ESHELBY, J. D. 1962. INTERACTION OF KINKS AND ELASTIC WAVES. *Proceedings of the Royal Society of London Series a-Mathematical and Physical Sciences*, 266, 222-&.
- EYRE, B. L. 1962a. DIRECT OBSERVATIONS OF NEUTRON IRRADIATION DAMAGE IN ALPHA-IRON. *Philosophical Magazine*, 7, 2107-&.
- EYRE, B. L. 1962b. OBSERVATIONS OF SLIP BANDS IN IRRADIATED PURE IRON. *Philosophical Magazine*, 7, 1609-&.
- EYRE, B. L. & BARTLETT, A. F. 1965. AN ELECTRON MICROSCOPE STUDY OF NEUTRON IRRADIATION DAMAGE IN ALPHA-IRON. *Philosophical Magazine*, 12, 261-&.
- EYRE, B. L. & BARTLETT, A. F. 1973. DAMAGE STRUCTURE FORMED IN MOLYBDENUM BY IRRADIATION IN A FAST-REACTOR AT 650 DEGREES C. *Journal of Nuclear Materials*, 47, 143-154.
- EYRE, B. L. & BULLOUGH, R. 1965. ON FORMATION OF INTERSTITIAL LOOPS IN BCC METALS. *Philosophical Magazine*, 12, 31-&.
- EYRE, B. L. & MAHER, D. M. 1971. NEUTRON IRRADIATION DAMAGE IN MOLYBDENUM .5. MECHANISMS OF VACANCY AND INTERSTITIAL LOOP GROWTH DURING POST-IRRADIATION ANNEALING. *Philosophical Magazine*, 24, 767-&.
- EYRE, B. L., MAHER, D. M. & PERRIN, R. C. 1977. ELECTRON-MICROSCOPE IMAGE-CONTRAST FROM SMALL DISLOCATION LOOPS .2. APPLICATION OF THEORETICAL PREDICTIONS TO DEFECT ANALYSIS IN IRRADIATED METALS. *Journal of Physics F-Metal Physics*, 7, 1371-&.
- FARENC, S., CAILLARD, D. & COURET, A. 1995. A NEW MODEL FOR THE PEAK OF ACTIVATION AREA OF ALPHA-TITANIUM. *Acta Metallurgica Et Materialia*, 43, 3669-3678.
- FARRELL, K. & BYUN, T. S. 2003. Tensile properties of ferritic/martensitic steels irradiated in HFIR, and comparison with spallation irradiation data. *Journal of Nuclear Materials*, 318, 274-282.
- FARRELL, K., BYUN, T. S. & HASHIMOTO, N. 2003. Mapping Flow Localization Processes in Deformation of Irradiated Reactor Structural Alloys. OAK RIDGE NATIONAL LABORATORY.
- FARRELL, K., BYUN, T. S. & HASHIMOTO, N. 2004. Deformation mode maps for tensile deformation of neutron-irradiated structural alloys. *Journal of Nuclear Materials*, 335, 471-486.
- FEDER, J., RUSSELL, K. C., LOTHE, J. & POUND, G. M. 1966. HOMOGENEOUS NUCLEATION AND GROWTH OF DROPLETS IN VAPOURS. *Advances in Physics*, 15, 111-&.

- FINNIS, M. W. & SINCLAIR, J. E. 1984. A SIMPLE EMPIRICAL N-BODY POTENTIAL FOR TRANSITION-METALS. *Philosophical Magazine a-Physics of Condensed Matter Structure Defects and Mechanical Properties*, 50, 45-55.
- FISHER, S. B., HARBOTTLE, J. E. & ALDRIDGE, N. 1985. RADIATION HARDENING IN MAGNOX PRESSURE-VESSEL STEELS. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London Series a-Mathematical Physical and Engineering Sciences*, 315, 301-332.
- FIVEL, M. 2008. *Simulations de la plasticité cristalline et transition d'échelles*. Mémoire d'Habilitation à Diriger les Recherches, Université Joseph Fourier.
- FIVEL, M. & FOREST, S. 2004. Plasticité cristalline et transition d'échelle. *Techniques de l'Ingénieur*. ETI Sciences & Techniques, M4018.
- FLYTZANIS, N. & CELLI, V. 1972. MOTION OF A SCREW DISLOCATION IN A CRYSTAL AT FINITE TEMPERATURE. *Journal of Applied Physics*, 43, 3301-&.
- FREDERIKSEN, S. L. & JACOBSEN, K. W. 2003. Density functional theory studies of screw dislocation core structures in bcc metals. *Philosophical Magazine*, 83, 365-375.
- FU, C. C., DALLA TORRE, J., WILLAIME, F., BOCQUET, J. L. & BARBU, A. 2005. Multiscale modelling of defect kinetics in irradiated iron. *Nature Materials*, 4, 68-74.
- FUJII, K. & FUKUYA, K. 2005. Characterization of defect clusters in ion-irradiated A533B steel. *Journal of Nuclear Materials*, 336, 323-330.
- GAO, F., BACON, D. J., OSETSKY, Y. N., FLEWITT, P. E. J. & LEWIS, T. A. 2000. Properties and evolution of sessile interstitial clusters produced by displacement cascades in alpha-iron. *Journal of Nuclear Materials*, 276, 213-220.
- GIBSON, J. B., GOLAND, A. N., MILGRAM, M. & VINEYARD, G. H. 1960. DYNAMICS OF RADIATION DAMAGE. *Physical Review*, 120, 1229-1253.
- GORMAN, J. A., WOOD, D. S. & VREELAND, T. 1969. MOBILITY OF DISLOCATIONS IN ALUMINUM. *Journal of Applied Physics*, 40, 833-&.
- GOURGUES, A. F., FLOWER, H. M. & LINDLEY, T. C. 2000. Electron backscattering diffraction study of acicular ferrite, bainite, and martensite steel microstructures. *Materials Science and Technology*, 16, 26-40.
- GRANATO, A. V., LUCKE, K., SCHLIPF, J. & TEUTONICO, L. J. 1964. ENTROPY FACTORS FOR THERMALLY ACTIVATED UNPINNING OF DISLOCATIONS. *Journal of Applied Physics*, 35, 2732-&.
- GROH, P. & CONTE, R. 1971. STRESS RELAXATION AND CREEP IN ALPHA-IRON FILAMENTARY SINGLE CRYSTALS AT LOW TEMPERATURE. *Acta Metallurgica*, 19, 895-&.
- GRUNE, D. 1986. Concurrent Versions System, A Method for Independent Cooperation. Amsterdam: Vrije Universiteit de Boelelaan.
- GUINAN, M. W. & KINNEY, J. H. 1982. MOLECULAR DYNAMIC CALCULATIONS OF ENERGETIC DISPLACEMENT CASCADES. *Journal of Nuclear Materials*, 104, 1319-1323.
- GUYOT, P. & DORN, J. E. 1967. A CRITICAL REVIEW OF PEIERLS MECHANISM. *Canadian Journal of Physics*, 45, 983-&.
- HASEGAWA, H., FINNIS, M. W. & PETTIFOR, D. G. 1985. A CALCULATION OF ELASTIC-CONSTANTS OF FERROMAGNETIC IRON AT FINITE TEMPERATURES. *Journal of Physics F-Metal Physics*, 15, 19-34.
- HASEGAWA, M. & NAGAI, Y. 2008. Irradiation-Induced Nanostructural Evolution in RPV Steels Studied by Positron Annihilation and 3D Atom Probe. Institute for Materials Research, Tohoku University, JAPAN.
- HASHIMOTO, N., BYUN, T. S., FARRELL, K. & ZINKLE, S. J. 2004. Deformation microstructure of neutron-irradiated pure polycrystalline metals. *Journal of Nuclear Materials*, 329-33, 947-952.
- HAUSILD, P. 2002. *Transition ductile-fragile dans un acier faiblement allié*. Doctorat de l'École Centrale Paris Thesis (PH D), Ecole Centrale Paris.
- HAUSILD, P., KYTKA, M., KARLIK, M. & PESEK, P. 2005. Influence of irradiation on the ductile fracture of a reactor pressure vessel steel. *Journal of Nuclear Materials*, 341, 184-188.
- HERNANDEZ MAYORAL, M. & G MEZ BRICE O, D. 2006. TEM characterisation of ion irradiated ultra high pure iron. *Integrated Project PERFECT*. CIEMAT - Departamento de Tecnología.
- HEWAT, A. W. 1972. VIBRATIONAL AMPLITUDES AND DEBYE-WALLER FACTORS FROM ELASTIC-CONSTANTS AND RAMAN FREQUENCIES. *Journal of Physics Part C Solid State Physics*, 5, 1309-&.

- HIRSCH, P. B. Year. In: Fifth international conference on crystallography, 1960 Cambridge. Cambridge University Press, 139.
- HIRSCH, P. B. 1968. SOME ASPECTS OF DEFORMATION OF BODY-CENTERED CUBIC METALS. *Transactions of the Japan Institute of Metals*, S 9, R30-&.
- HIRSCH, P. B. Year. In: SMALLMAN, R. E. & HARRIS, J. E., eds. Vacancies '76 : proceedings of a conference on "Point defect behaviour and diffusional processes", 1977 London. Metals Society, 95.
- HIRTH, J. P. & LOTHE, J. 1982. Diffusive Glide and Climb Processes. *Theory of dislocations*. 2nd ed ed. New York ; Chichester: Wiley.
- HOELZER, D. T. & EBRAHIMI, F. Year. Effect of copper and nickel on the neutron irradiation damage in iron alloys. In: ROBERTSON, I. M., REHN, L. E., ZINKLE, S. J. & PHYTHIAN, W. J., eds. Microstructure of Irradiated Materials. Symposium, 29 Nov.-1 Dec. 1995 Boston, MA., Mater. Res. Soc, 57-62.
- HORTON, L. L. & FARRELL, K. 1984. THE TEMPERATURE-DEPENDENCE OF THE DAMAGE MICROSTRUCTURES IN NEUTRON-IRRADIATED VANADIUM. *Journal of Nuclear Materials*, 122, 687-692.
- JASSBY, K. M. & VREELAND, T. 1971. DISLOCATION MOBILITY IN COPPER AND ZINC AT 44 DEGREES K. *Scripta Metallurgica*, 5, 1007-&.
- JENKINS, M. L., ENGLISH, C. A. & EYRE, B. L. 1978. HEAVY-ION IRRADIATION OF ALPHA-IRON. *Philosophical Magazine a-Physics of Condensed Matter Structure Defects and Mechanical Properties*, 38, 97-114.
- JOHNSON, R. A. 1964. INTERSTITIALS + VACANCIES IN ALPHA IRON. *Physical Review a-General Physics*, 134, 1329-&.
- KAGANOV, M. I., KRAVCHEN.VY & NATSIK, V. D. 1973. BRAKING OF DISLOCATIONS IN METALS BY ELECTRONS. *Uspekhi Fizicheskikh Nauk*, 111, 655-682.
- KAWANISHI, H., ISHINO, S. & KURAMOTO, E. 1986. 14 MEV NEUTRON-IRRADIATION OF VANADIUM ALLOY (V-1 ATMOSPHERIC PERCENT-B). *Journal of Nuclear Materials*, 141, 899-902.
- KEH, A. S. & NAKADA, Y. 1967. PLASTICITY OF IRON SINGLE CRYSTALS. *Canadian Journal of Physics*, 45, 1101-&.
- KEH, A. S. & NAKADA, Y. 1968. YIELDING PLASTIC FLOW AND DISLOCATION SUBSTRUCTURE IN IRON SINGLE CRYSTALS. *Transactions of the Japan Institute of Metals*, S 9, 876-&.
- KIRITANI, M. 1986. OBSERVATION AND ANALYSIS OF DEFECT STRUCTURE EVOLUTION FROM RADIATION-DAMAGE BY D-T FUSION NEUTRONS. *Journal of Nuclear Materials*, 137, 261-278.
- KIRITANI, M., YOSHIDA, N. & ISHINO, S. 1984. THE JAPANESE EXPERIMENTAL PROGRAM ON RTNS-II OF DT-NEUTRON IRRADIATION OF MATERIALS. *Journal of Nuclear Materials*, 122, 602-607.
- KIRITANI, M., YOSHIE, T. & KOJIMA, S. 1986. FACTORS CONTROLLING THE NATURE AND AMOUNT OF RESIDUAL DEFECTS IN NEUTRON-IRRADIATED MATERIALS. *Journal of Nuclear Materials*, 141, 625-632.
- KIRK, M. A., ROBERTSON, I. M., JENKINS, M. L., ENGLISH, C. A., BLACK, T. J. & VETRANO, J. S. 1987. THE COLLAPSE OF DEFECT CASCADES TO DISLOCATION LOOPS. *Journal of Nuclear Materials*, 149, 21-28.
- KITAJIMA, K., ABE, H., AONO, Y., KURAMOTO, E. & TAKAMURA, S. 1982. EFFECTS OF LOW-TEMPERATURE NEUTRON-IRRADIATION ON THE MECHANICAL-PROPERTIES OF BCC METALS. *Journal of Nuclear Materials*, 108, 436-441.
- KOBELEV, N. P., SOIFER, Y. N. & ALSHITS, V. I. 1979. RATIO BETWEEN VISCOSITY AND RELAXATION COMPONENTS OF DISLOCATION DAMPING OF ULTRASOUND IN COPPER. *Fizika Tverdogo Tela*, 21, 1172-1179.
- KOCKS, U. F., ARGON, A. S. & ASHBY, M. F. 1975a. Activation Enthalpy and Activation Entropy. *Thermodynamics and kinetics of slip*. Oxford: Pergamon Press.
- KOCKS, U. F., ARGON, A. S. & ASHBY, M. F. 1975b. Empirical Laws. *Thermodynamics and kinetics of slip*. Oxford: Pergamon Press.
- KOCKS, U. F., ARGON, A. S. & ASHBY, M. F. 1975c. The Energy to Nucleate a Continuous Bulge. *Thermodynamics and kinetics of slip*. Oxford: Pergamon Press.
- KOCKS, U. F., ARGON, A. S. & ASHBY, M. F. 1975d. Frequency factors and Activation Entropies. *Thermodynamics and kinetics of slip*. Oxford: Pergamon Press.

- KOCKS, U. F., ARGON, A. S. & ASHBY, M. F. 1975e. Low Stresses and High Temperatures. *Thermodynamics and kinetics of slip*. Oxford: Pergamon Press.
- KOCKS, U. F., ARGON, A. S. & ASHBY, M. F. 1975f. Phenomenological Description of Glide Resistance Profiles. *Thermodynamics and kinetics of slip*. Oxford: Pergamon Press.
- KOCKS, U. F., ARGON, A. S. & ASHBY, M. F. 1975g. Profile Dependent on Temperature. *Thermodynamics and kinetics of slip*. Oxford: Pergamon Press.
- KOCKS, U. F., ARGON, A. S. & ASHBY, M. F. 1975h. *Thermodynamics and kinetics of slip*, Oxford, Pergamon Press.
- KOSEVICH, A. M. & NATSIK, V. D. 1967. SLOWING DOWN OF DISLOCATIONS BY SCATTERING OF ELASTIC WAVES FROM IMPURITIES. *Soviet Physics JETP-USSR*, 24, 810-&.
- KUBIN, L. P., CANOVA, G., CONDAT, M., DEVINCRE, B., PONTIKIS, V. & BRECHET, Y. 1992. Dislocation microstructures and plastic flow: a 3D simulation. *Diffusion and Defect Data - Solid State Data, Part B (Solid State Phenomena)*, 23-24, 455-472.
- KURAMOTO, E., AONO, Y. & KITAJIMA, K. 1979. THERMALLY ACTIVATED SLIP DEFORMATION OF HIGH-PURITY IRON SINGLE-CRYSTALS BETWEEN 4.2-K AND 300-K. *Scripta Metallurgica*, 13, 1039-1042.
- KWON, J., MOHAMED, H. F. M., KIM, Y. M. & KIM, W. 2007. Positron annihilation study and computational modeling of defect production in neutron-irradiated reactor pressure vessel steels. *Nuclear Instruments & Methods in Physics Research Section B-Beam Interactions with Materials and Atoms*, 262, 255-260.
- LAMBRECHT, M. & ALMAZOUZI, A. 2007a. Characterization of neutron irradiated samples (REVE matrix): Positron annihilation and mechanical properties. *Integrated Project PERFECT*. SCK-CEN.
- LAMBRECHT, M. & ALMAZOUZI, A. 2007b. Characterization of neutron irradiated samples (REVE matrix): Post-irradiation annealing of selected alloys. *Integrated Project PERFECT*. SCK-CEN.
- LAUTRIDOU, J. C. & PINEAU, A. 1981. CRACK INITIATION AND STABLE CRACK-GROWTH RESISTANCE IN A508 STEELS IN RELATION TO INCLUSION DISTRIBUTION. *Engineering Fracture Mechanics*, 15, 55-71.
- LAWSON, C. L., HANSON, R. J., KINCAID, D. R. & KROGH, F. T. 1979. Basic linear algebra subprograms for Fortran usage. *ACM Transactions on Mathematical Software*, 5, 308-323.
- LEMAIGNAN, C. 2003. *La rupture des matériaux*, Les Ulis, France, EDP sciences.
- LEMAIGNAN, C. 2004. *Science des matériaux pour le nucléaire*, Les Ulis, France, EDP Sciences.
- LENZ, D. & LUCKE, K. 1969. TEMPERATURE AND FREQUENCY DEPENDENCE OF DISLOCATION DAMPING OF LEAD. *Zeitschrift Fur Metallkunde*, 60, 375-&.
- LI, J. C. M. 1964. STRESS FIELD OF DISLOCATION SEGMENT. *Philosophical Magazine*, 10, 1097-&.
- LIBERT, M. 2007. *Etudes expérimentale et numérique de l'effet des mécanismes de plasticité sur la rupture fragile par clivage dans les aciers faiblement alliés*. Doctorat de l'École Centrale de Paris Thesis (PH D), Ecole Centrale de Paris.
- LITTLE, E. A., BULLOUGH, R. & WOOD, M. H. 1980. ON THE SWELLING RESISTANCE OF FERRITIC STEEL. *Proceedings of the Royal Society of London Series A-Mathematical Physical and Engineering Sciences*, 372, 565-&.
- LIU, X. Y. & BINER, S. B. 2008. Molecular dynamics simulations of the interactions between screw dislocations and self-interstitial clusters in body-centered cubic Fe. *Scripta Materialia*, 59, 51-54.
- LOTHE, J. 1960. ASPECTS OF THE THEORIES OF DISLOCATION MOBILITY AND INTERNAL FRICTION. *Physical Review*, 117, 704-708.
- LOTHE, J. 1962. THEORY DISLOCATION MOBILITY IN PURE SLIP. *Journal of Applied Physics*, 33, 2116-&.
- LOUCHET, F. 1976. *Plasticité des métaux de structure cubique centrée à basse température : déformation "in situ" par microscopie électronique à haute tension*. Doctorat Thesis (PH D), Université de Toulouse.
- LUFT, A. 1991. MICROSTRUCTURAL PROCESSES OF PLASTIC INSTABILITIES IN STRENGTHENED METALS. *Progress in Materials Science*, 35, 97-204.
- MAHAPATRA, R., GIRSHICK, A., POPE, D. P. & VITEK, V. 1995. DEFORMATION MECHANISMS OF NEAR-STOICHIOMETRIC SINGLE-PHASE TiAl SINGLE-

- CRYSTALS - A COMBINED EXPERIMENTAL AND ATOMISTIC MODELING STUDY. *Scripta Metallurgica Et Materialia*, 33, 1921-1927.
- MANTYLA, M., ROSSOLL, A., NEDBAL, I., PRIOUL, C. & MARINI, B. 1999. Fractographic observations of cleavage fracture initiation in a bainitic A508 steel. *Journal of Nuclear Materials*, 264, 257-262.
- MARIAN, J., CAI, W. & BULATOV, V. V. 2004. Dynamic transitions from smooth to rough to twinning in dislocation motion. *Nature Materials*, 3, 158-163.
- MARIAN, J., WIRTH, B. D., CARO, A., SADIGH, B., ODETTE, G. R., PERLADO, J. M. & DE LA RUBIA, T. D. 2002a. Dynamics of self-interstitial cluster migration in pure alpha-Fe and Fe-Cu alloys. *Physical Review B*, 65, 11.
- MARIAN, J., WIRTH, B. D., SCHAUBLIN, R., PERLADO, J. M. & DE LA RUBIA, T. D. 2002b. (100)-loop characterization in alpha-Fe: comparison between experiments and modeling. *Journal of Nuclear Materials*, 307, 871-875.
- MASTERS, B. C. 1965. DISLOCATION LOOPS IN IRRADIATED IRON. *Philosophical Magazine*, 11, 881-&.
- MATHIEU, J.-P. 2006. *Analyse et modélisation micromécanique du comportement et de la rupture fragile de l'acier 16MND5 : Prise en compte des hétérogénéités microstructurales*. Doctorat de l'Ecole Nationale Supérieure d'Arts et Métiers Thesis (PH D), Ecole Nationale Supérieure d'Arts et Métiers.
- MENDELEV, M. I., HAN, S., SROLOVITZ, D. J., ACKLAND, G. J., SUN, D. Y. & ASTA, M. 2003. Development of new interatomic potentials appropriate for crystalline and liquid iron. *Philosophical Magazine*, 83, 3977-3994.
- MESLIN, E., BARBU, A., PAREIGE, P. & RADIGUET, B. 2007. TEM study of interstitials dislocation loops formed in ferritic alloys under 1.5 MeV Kr ions irradiation. *Integrated Project PERFECT*. CEA/DEN/DMN/SRMP.
- MILESHINA, L. & NORDLUND, A. 2007. Pulsed Beam PAS characterisation of Ion irradiated materials. *Integrated Project PERFECT*. Chalmers University of Technology.
- MILOUDI, S. 1997. *Etude du dommage d'irradiation dans les aciers de cuve des réacteurs à eau pressurisée*. Doctorat Thesis (PH D), Université Paris XI Orsay.
- MOGFORD, I. L. & HULL, D. 1963. EFFECT OF TEMPERATURE AND NEUTRON IRRADIATION ON YIELD AND WORK HARDENING IN IRON. *Journal of the Iron and Steel Institute*, 201, 55-&.
- MONNET, G. & TEREITYEV, D. 2009. Structure and mobility of the $1/2 \langle 111 \rangle \{112\}$ edge dislocation in BCC iron studied by molecular dynamics. *Acta Materialia*, 57, 1416-1426.
- NAAMANE, S. 2008. *Etude de la déformation plastique de la ferrite à basse température: simulations de dynamique des dislocations*. Doctorat de l'Université Pierre et Marie Curie Thesis (PH D), Université Pierre et Marie Curie.
- NABARRO, F. R. N. 1947. DISLOCATIONS IN A SIMPLE CUBIC LATTICE. *Proceedings of the Physical Society of London*, 59, 256-272.
- NABARRO, F. R. N. 1951. THE INTERACTION OF SCREW DISLOCATIONS AND SOUND WAVES. *Proceedings of the Royal Society of London Series A-Mathematical and Physical Sciences*, 209, 278-290.
- NAKADA, Y. & KEH, A. S. 1968. SOLID SOLUTION STRENGTHENING IN FE-N SINGLE CRYSTALS. *Acta Metallurgica*, 16, 903-&.
- NAUDIN, C. 1999. *Modélisation de la ténacité de l'acier de cuve REP en présence de zones de ségrégation*. Doctorat de l'Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris Thesis (PH D), Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris.
- NICOL, A. C., JENKINS, M. L. & KIRK, M. A. Year. Matrix damage in iron. In: LUCAS, G. E., SNEAD, L. L., KIRK, M. A. & ELLIMAN, R. G., eds. *Microstructural Processes in Irradiated Materials - 2000. Symposium*, 27-29 Nov. 2001 Boston, MA,. Mater. Res. Soc., R1.3.1-R1.3.6.
- NINOMIYA, T. 1974. FRICTIONAL FORCE ACTING ON A DISLOCATION - FLUTTERING MECHANISM. *Journal of the Physical Society of Japan*, 36, 399-405.
- NOGARET, T., ROBERTSON, C. & RODNEY, D. 2007. Atomic-scale plasticity in the presence of Frank loops. *Philosophical Magazine*, 87, 945-966.
- NOHAVA, J., HAUSILD, P., KARLIK, M. & BOMPARD, P. 2002. Electron backscattering diffraction analysis of secondary cleavage: cracks in a reactor pressure vessel steel. *Materials Characterization*, 49, 211-217.

- NYE, J. F. 1953. SOME GEOMETRICAL RELATIONS IN DISLOCATED CRYSTALS. *Acta Metallurgica*, 1, 153-162.
- OBRTLİK, K., ROBERTSON, C. F. & MARINI, B. 2005. Dislocation structures in 16MND5 pressure vessel steel strained in uniaxial tension. *Journal of Nuclear Materials*, 342, 35-41.
- ODETTE, G. R. Year. Radiation induced microstructural evolution in reactor pressure vessel steels. In: ROBERTSON, I. M., REHN, L. E., ZINKLE, S. J. & PHYTHIAN, W. J., eds. Microstructure of Irradiated Materials. Symposium, 29 Nov.-1 Dec. 1995 Boston, MA., Mater. Res. Soc, 137-148.
- ODETTE, G. R. 1998. Neutron irradiation effects in reactor pressure vessel steels and weldments. IAEA IWG-LMNPP-98/3.
- ODETTE, G. R. & LUCAS, G. E. 1998. Recent progress in understanding reactor pressure vessel steel embrittlement. *Radiation Effects and Defects in Solids*, 144, 189-231.
- ODETTE, G. R. & LUCAS, G. E. 2001. Embrittlement of nuclear reactor pressure vessels. *Journal of the Minerals Metals & Materials Society*, 53, 18-22.
- ODETTE, G. R. & WIRTH, B. D. 1997. A computational microscopy study of nanostructural evolution in irradiated pressure vessel steels. *Journal of Nuclear Materials*, 251, 157-171.
- ODETTE, G. R., YAMAMOTO, T. & KLINGENSMITH, D. 2005. On the effect of dose rate on irradiation hardening of RPV steels. *Philosophical Magazine*, 85, 779-797.
- OHMORI, Y., OHTANI, H. & KUNITAKE, T. 1974. Tempering of the bainite and the bainite/martensite duplex structure in a low-carbon low-alloy steel. *Metal Science*, 8, 357-366.
- OSETSKY, Y. N. & BACON, D. J. 2003. Void and precipitate strengthening in alpha-iron: what can we learn from atomic-level modelling? *Journal of Nuclear Materials*, 323, 268-280.
- OSETSKY, Y. N., BACON, D. J. & MOHLES, V. 2003a. Atomic modelling of strengthening mechanisms due to voids and copper precipitates in alpha-iron. *Philosophical Magazine*, 83, 3623-3641.
- OSETSKY, Y. N., BACON, D. J. & SERRA, A. 1999. Thermally activated glide of small dislocation loops in metals. *Philosophical Magazine Letters*, 79, 273-282.
- OSETSKY, Y. N., BACON, D. J., SERRA, A., SINGH, B. N. & GOLUBOV, S. I. 2000a. Stability and mobility of defect clusters and dislocation loops in metals. *Journal of Nuclear Materials*, 276, 65-77.
- OSETSKY, Y. N., BACON, D. J., SERRA, A., SINGH, B. N. & GOLUBOV, S. I. 2003b. One-dimensional atomic transport by clusters of self-interstitial atoms in iron and copper. *Philosophical Magazine*, 83, 61-91.
- OSETSKY, Y. N., SERRA, A., SINGH, B. N. & GOLUBOV, S. I. 2000b. Structure and properties of clusters of self-interstitial atoms in fcc copper and bcc iron. *Philosophical Magazine a-Physics of Condensed Matter Structure Defects and Mechanical Properties*, 80, 2131-2157.
- PAL-VAL, P. P., PLATKOV, V. Y. & STARTSEV, V. I. 1976. TEMPERATURE-DEPENDENCE OF DISLOCATION DRAG CONSTANT IN ANTIMONY. *Physica Status Solidi a-Applied Research*, 38, 383-391.
- PEACH, M. & KOEHLER, J. S. 1950. THE FORCES EXERTED ON DISLOCATIONS AND THE STRESS FIELDS PRODUCED BY THEM. *Physical Review*, 80, 436-439.
- PEIERLS, R. E. 1940. The size of a dislocation. *Proceedings of the Physical Society of London*, 52, 34-37.
- PELLI, R., NENONNEN, P. & KEMPPAINEN, M. 1983. Reactor Pressure Vessel Steels ASTM A533B and A508 cl2 : microstructural investigations. Espoo: Technical Research Centre of Finland (VTT).
- PESCI, R. 2004. *Etude micromécanique et caractérisation expérimentale du comportement et de l'endommagement de l'acier de cuve 16MND5 à basses températures*. Doctorat de l'Ecole Nationale Supérieure d'Arts et Métiers Thesis (PH D), Ecole Nationale Supérieure d'Arts et Métiers.
- PHYTHIAN, W. J., STOLLER, R. E., FOREMAN, A. J. E., CALDER, A. F. & BACON, D. J. 1995. A COMPARISON OF DISPLACEMENT CASCADES IN COPPER AND IRON BY MOLECULAR-DYNAMICS AND ITS APPLICATION TO MICROSTRUCTURAL EVOLUTION. *Journal of Nuclear Materials*, 223, 245-261.
- PINEAU, A. 2006. Development of the local approach to fracture over the past 25 years: theory and applications. *International Journal of Fracture*, 138, 139-166.
- POIRIER, J.-P. 1976. *Plasticité à haute température des solides cristallins*, Paris, Eyrolles.

- QUESNEL, D. J., SATO, A. & MESHII, M. 1975. SOLUTION SOFTENING AND HARDENING IN IRON-CARBON SYSTEM. *Materials Science and Engineering*, 18, 199-208.
- QUEYREAU, S. 2008b. *Étude des Mécanismes d'Écrouissage Sous Irradiation de la Ferrite par Simulations de Dynamique de Dislocations*. Doctorat de l'Université Pierre et Marie Curie Thesis (PH D), Université Pierre et Marie Curie.
- RAYNE, J. A. & CHANDRASEKHAR, B. S. 1961. ELASTIC CONSTANTS OF IRON FROM 4.2 TO 300DEGREESK. *Physical Review*, 122, 1714-&.
- RENEVEY, S. 1997. *Approches globale et locale de la rupture dans le domaine de transition fragile-ductile d'un acier faiblement allié*. Docteur en métallurgie et matériaux de l'Université Paris XI Orsay Thesis (PH D), Université Paris XI Orsay.
- ROBERTSON, C. F., OBRTLIK, K. & MARINI, B. 2007. Dislocation structures in 16MND5 pressure vessel steel strained in uniaxial tension at different temperatures from -196 degrees C up to 25 degrees C. *Journal of Nuclear Materials*, 366, 58-69.
- ROBERTSON, I. M., JENKINS, M. L. & ENGLISH, C. A. 1982. LOW-DOSE NEUTRON-IRRADIATION DAMAGE IN ALPHA-IRON. *Journal of Nuclear Materials*, 108, 209-221.
- ROMERO, I., SEGURADO, J. & LLORCA, J. 2008. Dislocation dynamics in non-convex domains using finite elements with embedded discontinuities. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 16.
- RONG, Z., OSETSKY, Y. N. & BACON, D. J. 2005a. A model for the dynamics of loop drag by a gliding dislocation. *Philosophical Magazine*, 85, 1473-1493.
- RONG, Z. W., BACON, D. & OSETSKY, Y. 2005b. Dynamics of drag of self-interstitial clusters by an edge dislocation in iron. *Materials Science and Engineering a-Structural Materials Properties Microstructure and Processing*, 400, 378-381.
- ROSSOLL, A. 1998. *Détermination de la ténacité d'un acier faiblement allié à partir de l'essai de Charpy instrumenté*. Doctorat de l'École Centrale de Paris Thesis (PH D), Ecole Centrale Paris.
- RUHLE, M. & CRUMP, J. C. 1970. Density and size distribution of defect clusters in neutron-irradiated copper. *Physica Status Solidi A*, 2, 257-260.
- RUSSELL, K. C. & BROWN, L. M. 1972. DISPERSION STRENGTHENING MODEL BASED ON DIFFERING ELASTIC-MODULI APPLIED TO IRON-COPPER SYSTEM. *Acta Metallurgica*, 20, 969-&.
- SAARINEN, K. 2000. Characterization of native point defects in GaN by positron annihilation spectroscopy. In: MANASREH, M. O. (ed.) *III-Nitride Semiconductors: Electrical, Structural and Defects Properties*. 1 edition (Nov 2000) ed. Amsterdam: Elsevier Science.
- SAKA, H. & IMURA, T. 1973. MOBILITY OF DISLOCATIONS IN FE-3 PERCENT SI. *Physica Status Solidi a-Applied Research*, 19, 653-660.
- SCATTERGOOD, R. O. & BACON, D. J. 1982. THE STRENGTHENING EFFECT OF VOIDS. *Acta Metallurgica*, 30, 1665-1677.
- SCHMID, E. & BOAS, W. 1950. *Plasticity of crystals : with special reference to metals*, London, F.A. Hughes.
- SCHOECK, G. 1965. ACTIVATION ENERGY OF DISLOCATION MOVEMENT. *Physica Status Solidi*, 8, 499-&.
- SCHOECK, G. 1979. Thermodynamics and thermal activation of dislocations. In: NABARRO, F. R. N. (ed.) *Dislocations in solids. Volume 2, Dislocations in crystals*. Amsterdam ; Oxford: North-Holland.
- SEEGER, A. 1984. In: VEYSSI RE, P., KUBIN, L. & CASTAING, J. (eds.) *Dislocations 1984 : comptes rendus du Colloque International du CNRS Dislocations : Structure de coeur et propriétés physiques = Core structure and physical properties*. Paris: Centre National de la Recherche Scientifique.
- SEEGER, A. & BUCK, O. 1960. DIE EXPERIMENTELLE ERMITTLUNG DER ELASTISCHEN KONSTANTEN HOHERER ORDNUNG. *Zeitschrift Fur Naturforschung Part a-Astrophysik Physik Und Physikalische Chemie*, 15, 1056-1067.
- SEEGER, A. & SCHILLER, P. 1962. BILDUNG UND DIFFUSION VON KINKEN ALS GRUNDPROZESS DER VERSETZUNGSBEWEGUNG BEI DER MESSUNG DER INNEREN REIBUNG. *Acta Metallurgica*, 10, 348-&.
- SEEGER, A. & WUTHRICH, C. 1976. DISLOCATION RELAXATION PROCESSES IN BODY-CENTERED CUBIC METALS. *Nuovo Cimento Della Societa Italiana Di Fisica B-General Physics Relativity Astronomy and Mathematical Physics and Methods*, 33, 38-75.

- SESTAK, B. & LIBOVICKY, S. 1963. TRANSITION TO CRYSTALLOGRAPHIC SLIP ON FE-3 PERCENT SI SINGLE CRYSTALS AT 78 DEGREES K. *Acta Metallurgica*, 11, 1190-&.
- SESTIER, K. 1998. *Evolution microstructurale et comportement mécanique à haute température de l'acier de cuve 16MND5 en situation d'accident grave*. Doctorat de l'INP Grenoble Thesis (PH D), Grenoble INP.
- SHIGESATO, G. 2007a. *Development of dislocation structures in steels: Relation with the mechanical properties*. Doctorat de l'INP Grenoble Thesis (PH D), Grenoble INP - ED "Matériaux et Génie des Procédés".
- SHIMIZU, F., OGATA, S., YAMAGUCHI, M., KANO, T., KIMIZUKA, H., ITAKURA, M. & KABURAKI, H. 2007. First-principles Calculation on Core Structures and Peierls Stress of a Screw Dislocation in BCC Iron. In: KABURAKI, H. (ed.) *Annual Report of the Earth Simulator Center*. Japan Atomic Energy Agency.
- SHIN, C. 2004b. *3D Discrete Dislocation Dynamics applied to dislocation-precipitate interactions*. Doctorat de l'INP Grenoble Thesis (PH D), Grenoble INP - ED "Matériaux et Génie des Procédés".
- SIKKA, V. K. & MOTEFF, J. 1973. RAFTING IN NEUTRON-IRRADIATED TUNGSTEN. *Journal of Nuclear Materials*, 46, 217-219.
- SIMMONS, J. P., RAO, S. I. & DIMIDUK, D. M. 1997. Atomistics simulations of structures and properties of $1/2 \langle 110 \rangle$ dislocations using three different embedded-atom method potentials fit to gamma-TiAl. *Philosophical Magazine a-Physics of Condensed Matter Structure Defects and Mechanical Properties*, 75, 1299-1328.
- SIMONET, L. 2006. *Effet des hétérogénéités sur le Pouvoir Thermoélectrique de l'acier de cuve*. Doctorat Thesis (PH D), L'Institut National des Sciences Appliquées de Lyon.
- SINGH, B. N. & ZINKLE, S. J. Year. DEFECT ACCUMULATION IN PURE FCC METALS IN THE TRANSIENT REGIME - A REVIEW. In, 1993. Elsevier Science Bv, 212-229.
- SMIDT, F. A. 1969. AN ANALYSIS OF THERMALLY ACTIVATED FLOW IN ALPHA-IRON BASED ON T-TAU' CONSIDERATIONS. *Acta Metallurgica*, 17, 381-&.
- SONEDA, N. & DE LA RUBIA, T. D. 1998. Defect production, annealing kinetics and damage evolution in alpha-Fe: an atomic-scale computer simulation. *Philosophical Magazine a-Physics of Condensed Matter Structure Defects and Mechanical Properties*, 78, 995-1019.
- SONEDA, N., ISHINO, S. & DE LA RUBIA, T. D. 2001. Vacancy loop formation by 'cascade collapse' in alpha-Fe: a molecular dynamics study of 50 keV cascades. *Philosophical Magazine Letters*, 81, 649-659.
- SONEDA, N., ISHINO, S., TAKAHASHI, A. & DOHI, K. 2003. Modeling the microstructural evolution in bcc-Fe during irradiation using kinetic Monte Carlo computer simulation. *Journal of Nuclear Materials*, 323, 169-180.
- SPACZER, M., CARO, A., VICTORIA, M. & DELARUBIA, T. 1994. COMPUTER-SIMULATION OF DISORDERING KINETICS IN IRRADIATED A(3)B INTERMETALLIC COMPOUNDS. *Journal of Nuclear Materials*, 212, 164-167.
- SPITZIG, W. A. 1973. EFFECTS OF ORIENTATION, TEMPERATURE AND STRAIN RATE ON DEFORMATION OF FE-0.16 WT PERCENT TI SINGLE-CRYSTALS. *Materials Science and Engineering*, 12, 191-202.
- SPITZIG, W. A. & KEH, A. S. 1970a. EFFECT OF ORIENTATION AND TEMPERATURE ON PLASTIC FLOW PROPERTIES OF IRON SINGLE CRYSTALS. *Acta Metallurgica*, 18, 611-&.
- SPITZIG, W. A. & KEH, A. S. 1970b. ORIENTATION DEPENDENCE OF STRAIN-RATE SENSITIVITY AND THERMALLY ACTIVATED FLOW IN IRON SINGLE CRYSTALS. *Acta Metallurgica*, 18, 1021-&.
- STADELMANN, P. A. 1987. EMS - A SOFTWARE PACKAGE FOR ELECTRON-DIFFRACTION ANALYSIS AND HREM IMAGE SIMULATION IN MATERIALS SCIENCE. *Ultramicroscopy*, 21, 131-145.
- STEIN, D. F. 1966. EFFECT OF CARBON ON STRAIN-RATE SENSITIVITY OF IRON SINGLE CRYSTALS. *Acta Metallurgica*, 14, 99-&.
- STOLLER, R. E. 1996. Point defect survival and clustering fractions obtained from molecular dynamics simulations of high energy cascades. *Journal of Nuclear Materials*, 233, 999-1003.
- STOLLER, R. E. 2000. The role of cascade energy and temperature in primary defect formation in iron. *Journal of Nuclear Materials*, 276, 22-32.
- STOLLER, R. E., ODETTE, G. R. & WIRTH, B. D. 1997. Primary damage formation in bcc iron. *Journal of Nuclear Materials*, 251, 49-60.

- SUZUKI, T., TAKEUCHI, S. & YOSHINAGA, H. 1991. *Dislocation dynamics and plasticity*, Berlin ; London, Springer-Verlag.
- TAHAR, M. 1998. *Applications de l'approche locale de la rupture fragile à l'acier 16MND5: Corrélation résilience-ténacité et probabilité de ducture bimodale (clivage et intergranulaire)*. Doctorat de l'Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris Thesis (PH D), Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris.
- TAKEUCHI, S. 1981. In: LEE, J. K. (ed.) *Interatomic Potentials and Crystalline Defects*. Warrendale, PA: The Metallurgical Society of AIME.
- TAKEUCHI, S., FURUBAYA, E. & TAO, K. 1967. ORIENTATION DEPENDENCE OF YIELD STRESS IN 4.4 PERCENT SILICON IRON SINGLE CRYSTALS. *Acta Metallurgica*, 15, 1179-&.
- TANAKA, M., TARLETON, E. & ROBERTS, S. G. 2008. The brittle-ductile transition in single-crystal iron. *Acta Materialia*, 56, 5123-5129.
- TANG, M., KUBIN, L. P. & CANOVA, G. R. 1998. Dislocation mobility and the mechanical response of BCC single crystals: A mesoscopic approach. *Acta Materialia*, 46, 3221-3235.
- TANGUY, B. 2001. *Modélisation de l'essai Charpy par l'approche locale de la rupture. Application au cas de l'acier 16MND5 dans le domaine de transition*. Doctorat de l'Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris Thesis (PH D), Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris.
- TEODOSIU, C. & SIDOROFF, F. 1976. FINITE THEORY OF ELASTOVISCOPLASTICITY OF SINGLE-CRYSTALS. *International Journal of Engineering Science*, 14, 713-723.
- TERENTYEV, D., BACON, D. J. & OSETSKY, Y. N. 2008a. Interaction of an edge dislocation with voids in alpha-iron modelled with different interatomic potentials. *Journal of Physics-Condensed Matter*, 20, 11.
- TERENTYEV, D., BACON, D. J. & OSETSKY, Y. N. 2009. Reactions between a $1/2\langle 111 \rangle$ screw dislocation and $\langle 100 \rangle$ interstitial dislocation loops in alpha-iron modelled at atomic scale. *Philosophical Magazine*, i-First, 1-15.
- TERENTYEV, D., GRAMMATIKOPOULOS, P., BACON, D. J. & OSETSKY, Y. N. 2008b. Simulation of the interaction between an edge dislocation and a '100' interstitial dislocation loop in alpha-iron. *Acta Materialia*, 56, 5034-5046.
- TERENTYEV, D., MALERBA, L., BACON, D. J. & OSETSKY, Y. N. 2007. The effect of temperature and strain rate on the interaction between an edge dislocation and an interstitial dislocation loop in alpha-iron. *Journal of Physics-Condensed Matter*, 19.
- TETELMAN, A. S. & MCEVILY, A. J. 1967. *Fracture of structural materials*, New York ; London, Wiley.
- URABE, N. & WEERTMAN, J. 1975. DISLOCATION MOBILITY IN POTASSIUM AND IRON SINGLE-CRYSTALS. *Materials Science and Engineering*, 18, 41-49.
- VERDIER, M., FIVEL, M. & GROMA, I. 1998. Mesoscopic scale simulation of dislocation dynamics in fcc metals: Principles and applications. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 6, 755-770.
- VICTORIA, M., BALUC, N., BAILAT, C., DAI, Y., LUPPO, M. I., SCHAUBLIN, R. & SINGH, B. N. 2000. The microstructure and associated tensile properties of irradiated fcc and bcc metals. *Journal of Nuclear Materials*, 276, 114-122.
- VITEK, V. 1966. THERMALLY ACTIVATED MOTION OF SCREW DISLOCATIONS IN BCC METALS. *Physica Status Solidi*, 18, 687-&.
- VITEK, V. & IGARASHI, M. 1991. CORE STRUCTURE OF $1/3\langle 1120 \rangle$ SCREW DISLOCATIONS ON BASAL AND PRISMATIC PLANES IN HCP METALS - AN ATOMISTIC STUDY. *Philosophical Magazine*, 63, 1059-1075.
- WARD, A. E. & FISHER, S. B. 1989. DISLOCATION LOOP GROWTH IN PURE IRON UNDER ELECTRON-IRRADIATION. *Journal of Nuclear Materials*, 166, 227-234.
- WEINER, J. H. 1964. DISLOCATION VELOCITIES IN LINEAR CHAIN. *Physical Review a-General Physics*, 136, A863-&.
- WEYGAND, D., FRIEDMAN, L. H., VAN DER GIESSEN, E. & NEEDLEMAN, A. 2001. Discrete dislocation modeling in three-dimensional confined volumes. *Materials Science and Engineering a-Structural Materials Properties Microstructure and Processing*, 309, 420-424.
- WIRTH, B. D., ODETTE, G. R., MAROUDAS, D. & LUCAS, G. E. 1997. Energetics of formation and migration of self-interstitials and self-interstitial clusters in alpha-iron. *Journal of Nuclear Materials*, 244, 185-194.

-
- WIRTH, B. D., ODETTE, G. R., MAROUDAS, D. & LUCAS, G. E. 2000. Dislocation loop structure, energy and mobility of self-interstitial atom clusters in bcc iron. *Journal of Nuclear Materials*, 276, 33-40.
- YOSHIDA, N., AKASHI, Y., KITAJIMA, K. & KIRITANI, M. 1985. FORMATION OF SECONDARY DEFECTS IN COPPER BY 14 MEV NEUTRON-IRRADIATION AND THEIR EFFECTS ON MICROSTRUCTURE EVOLUTION. *Journal of Nuclear Materials*, 133, 405-409.
- YOSHIDA, N., KIRITANI, M. & FUJITA, F. E. 1975. ELECTRON RADIATION-DAMAGE OF IRON IN HIGH-VOLTAGE ELECTRON-MICROSCOPE. *Journal of the Physical Society of Japan*, 39, 170-179.
- ZELDOVICH, J. B. 1943. On the theory of new phase formation: cavitation. *Acta Physicochim. URSS*, 18, 1-22.
- ZHANG, H. L., PUNKKINEN, M. P. J., JOHANSSON, B., HERTZMAN, S. & VITOS, L. 2010. Single-crystal elastic constants of ferromagnetic bcc Fe-based random alloys from first-principles theory. *Physical Review B*, 81.
- ZINKLE, S. J. 1987. MICROSTRUCTURE AND PROPERTIES OF COPPER-ALLOYS FOLLOWING 14-MEV NEUTRON-IRRADIATION. *Journal of Nuclear Materials*, 150, 140-158.
- ZINKLE, S. J. & MATSUKAWA, Y. 2004. Observation and analysis of defect cluster production and interactions with dislocations. *Journal of Nuclear Materials*, 329-33, 88-96.
- ZINKLE, S. J. & SINGH, B. N. 2006. Microstructure of neutron-irradiated iron before and after tensile deformation. *Journal of Nuclear Materials*, 351, 269-284.

Liste des Figures et Tableaux

Fig. I-2 :	Diagramme de principe d'une simulation en dynamique des dislocations (DD) [§3]	7
Fig. II-1:	Nomenclature AFNOR pour l'acier de cuve 16MND5	13
Fig. II-2 :	Évolution des teneurs en phosphore (a) et soufre (b) dans l'acier 16MND5 entre 1970 et 1990 (Bocquet et al., 1994).	14
Tableau II-1 :	Spécification RCC-M (2007) pour la composition chimique moyenne de l'acier 16MND5	14
Tableau II-2 :	Spécifications pour les caractéristiques mécaniques de l'acier 16MND5. Les essais sont à réaliser selon la procédure et avec les éprouvettes décrites dans le chapitre MC1000 (AFCEN, 2007). Trois éprouvettes sont analysées pour chaque cas dans les essais de résilience contre une seule pour les essais de traction.	14
Tableau II-3 :	Évolution des dimensions de la cuve des réacteurs REP depuis le 900 MWe jusqu'à l'EPR.	15
Fig. II-3 :	Eléments d'une cuve de réacteur à eau pressurisée (REP). On distingue les deux viroles de cœur (C1 et C2), la virole porte tubulure (B), et les deux calottes supérieure et inférieure (Cadiou et al., 1977).	15
Fig. II-4 :	Structure de solidification d'un lingot pour fabrication de viroles de cuve de REP. On distingue la zone de ségrégations majeure (positive et négative) au centre, ainsi que les ségrégations mineures ou veines sombres (A) en périphérie (Bocquet et al., 1994).	16
Fig. II-5 :	Distribution comparée des singularités sur une pièce creuse issue d'un lingot plein ou creux (Benhamou et al., 2008).	16
Fig. II-6 :	Microstructure de l'acier 16MND5 d'une virole de REP : a) microscopie optique, attaque au bisulfite de sodium ; b) microscopie électronique à balayage, attaque au Nital 2% (Hausild, 2002).	18
Fig. II-7 :	Croissance de la ferrite bainitique à partir de l'ancien joint de grain austénitique (a) ; précipitation de la cémentite dans la bainite supérieure (b) ou inférieure (c) (Ohmori et al., 1974).	19
Fig. II-8 :	Deux observations d'un même échantillon de bainite inférieure revenue : a) au microscope optique après attaque au Nital ; c) par technique EBSD ; b) superposition des deux images (Mathieu, 2006).	19
Fig. II-9 :	Mesures pas EBSD de la distribution des angles de désorientation entre lattes dans un ancien grain austénitique d'un acier 16MND5 à microstructure de bainite revenue (Hausild, 2002).	20
Tableau II-4 :	Mesures de désorientation des lattes de bainite dans un même paquet cristallographique et dans des paquets différents pour l'acier 16MND5 des viroles de cuve REP.	20
Tableau II-5 :	Mesures des dimensions caractéristiques des éléments de la microstructure bainitique de l'acier 16MND5 dans les viroles des cuves REP.	21
Fig. II-10 :	Courbes de traction rationnelles pour l'acier 16MND5 entre 77K et 298K avec $\dot{\epsilon} = 5.10^{-4} s^{-1}$ (Libert, 2007).....	22
Fig. II-11 :	Éprouvettes pour essais de ténacité : a) Éprouvettes CT (deux tailles différentes), et Charpy (en bas à droite) ; b) éprouvette pour essai de Pellini avec fissure arrêtée ; c) avec propagation catastrophique de la fissure.	24
Fig. II-12 :	Transition ductile fragile observé lors des essais Charpy pour différentes familles d'aciers(Lemaignan, 2004), et illustration des fascias de rupture par déchirure ductile et clivage dans l'acier 16MND5 (Hausild, 2002).	24
Fig. II-13 :	Évolution du K_{IC} en fonction de la température d'un acier bainitique de cuve REP : « courbe maîtresse »	25
Fig. III-1 :	Diagramme de phase (Alshits and Indenbom, 1986) montrant la différence de l'atténuation d'une onde élastique qui interagit avec le sous-système de phonons d'un cristal, en fonction de la région du plan $\{\vec{q}, q\}$ dans laquelle se trouvent son vecteur d'onde et sa fréquence : (I) Région dans laquelle les processus de relaxation macroscopiques tels que la viscosité des phonons ou les pertes	

thermoélastiques prédominant ; (II) Région quantique où la diffusion des phonons par le champ élastique de l'onde joue le rôle principal ; (III) Région cinétique où on a une compétition entre les processus de diffusion et relaxation.	33
Tableau III-1 : Valeurs du coefficient de Murnaghan « n » pour le Cu et le Fe (Seeger and Buck, 1960).	35
Fig. III-2 : Forme de la fonction $f_3(T/\theta)$, qui détermine la dépendance en température de l'effet « flutter », pour une dislocation vis (1) et coin (2) (Alshits and Sandler, 1974).	36
Fig. III-3 : Dépendance en température de $B(T)$: comparaisons entre les résultats théoriques (ligne continue) en utilisant (3.14) et les points expérimentaux pour : a) Zn et Cu (Jassby and Vreeland, 1971), KCl (Andronov et al., 1975), et Sb (Pal-Val et al., 1976) ; b) Al (Gorman et al., 1969) et Csl (Darinskaya et al., 1981). Les valeurs de θ et Δ utilisées dans l'application numérique sont recueillies dans le Tableau III-2. Celle de Δ est obtenue en extrapolant la forme asymptotique de $B(T)/B(\theta)$ jusqu'à $T = 0$ K (a).	39
Tableau III-2 : Valeurs de Δ et θ utilisées dans (3.14) pour tracer les courbes théoriques de la Fig. III-3.	39
Tableau III-3 : Hiérarchie générale des mécanismes de friction dynamique des dislocations (Alshits and Indenbom, 1986); Ordre de grandeur comparée au mécanisme du « vent de phonons » à la température de Debye (θ) et dépendance en température.	39
Fig. III-4 : Dépendance en température du coefficient de frottement phonons : (a) estimations analytiques pour le cuivre et le fer sans prendre en compte l'influence des vallées de Peierls (application numérique de l'expression (3.5) avec les approximations $r_0 = 3a$ et $\beta_0 = 30$ dans les deux cas). (b) mesures expérimentales réalisées sur des monocristaux de fer « pur » (impuretés 40.6ppm, dont 1.4ppm C et 0.1ppm N) par Urabe et Weertman (1975).	40
Fig. III-5 : Mesures expérimentales de la vitesse des dislocations vis et coin en fonction de la contrainte appliquée dans des monocristaux de fer « pur » (impuretés 40.6ppm, dont seuls 1.4ppm C et 0.1ppm N sont précisées). entre 4K et 298K (Urabe and Weertman, 1975). Ces mesures sont obtenues par la méthode dite « d'impulsions de contrainte », en regardant la position des dislocations dans leur plan de glissement avant et après chaque impulsion.	41
Tableau III-4 : Comparaison des prédictions théoriques du coefficient de frottement visqueux B_{vis} dans le fer à température ambiante avec les mesures expérimentales de Urabe et Weertman (1975). Les calculs utilisent les expressions du Tableau III-3, avec la vitesse limite de l'expression (3.11) pour le fer, soit 373 m/s. Pour la diffusion Raman nous considérons le milieu entre les deux extrêmes donnés par la formule (3.12) et le Tableau III-3 (entre parenthèses). L'ensemble des grandeurs physiques et paramètres utilisés sont expliqués dans l'annexe A.	42
Fig. III-6 : Comparaison entre l'évolution théorique de la vitesse des dislocations coin dans le fer avec la température et les résultats obtenus en MD par Terentyev et al. (2008a) pour une contrainte appliquée de 50MPa. Dans le modèle théorique, les deux potentiels EAM utilisés par Terentyev et al. se différencient par leur contrainte de Peierls, 25MPa pour l'A97 et 90MPa pour l'A04. L'ensemble des grandeurs physiques et paramètres utilisés sont expliqués dans l'annexe A.	43
Fig. III-7 : Description schématique de la variation de l'énergie de la dislocation, E , en fonction du déplacement dans la direction du glissement, y , dans un potentiel périodique de Peierls (Caillard and Martin, 2003a).	44
Fig. III-8 : Illustration du modèle de doubles décrochements (Seeger and Schiller, 1962) pour le mouvement des dislocations vis à travers le potentiel de Peierls dans le fer CC. La dislocation avance par nucléations et propagations successives de dd, qui se déplacent le long de la ligne à vitesse v_d	45
Fig. III-9 : Annihilation de dd à une séparation X_∞ [d'après H&L Fig.15-10]	47
Fig. III-10 : Un décrochement se déplaçant dans le plan xy à la vitesse v_d sous l'effet d'une contrainte de cisaillement $\tau = \tau_{xz}$	48
Fig. III-11 : Double décrochements le long d'une ligne de dislocation [H&L Fig.14-1].	48
Fig. III-12 : Energie libre de formation d'un dd en fonction de la séparation entre décrochements (I) et pour différentes cisssions résolues τ [d'après H&L Fig 15-6]	48
Fig. III-13 : Schéma des configurations critiques d'un double décrochement à faible (a) et forte contrainte (b) 49	

Tableau III-5 : Domaines de validité des différentes approximations de l'énergie d'activation dans la loi de mobilité des vis.	53
Fig. III-14 : Dislocation avançant à travers un potentiel de Peierls par nucléation et propagation de dd. La dislocation est alignée selon la direction x et avance selon y . a) « bosse » en ① et décrochements en interaction ②. b) Diagramme d'énergie (forte contrainte). c) Diagramme d'énergie (faible contrainte). (Caillard and Martin, 2003b)	53
Fig. III-15 : Description schématique des différents potentiels de Peierls utilisés dans la suite (Caillard and Martin, 2003b).	54
Tableau III-6 : Formes analytiques de différents potentiels de Peierls, $E(y)$, ainsi que leur contrainte de Peierls (τ_p) et énergie de formation d'un décrochement (U_d) associées. Les expressions d' U_d sont obtenues en faisant l'approximation dite « de tension de ligne » détaillée plus bas, sauf dans le cas du potentiel abrupt.	54
Fig. III-16 : Configuration de bosse métastable à l'équilibre et diagramme d'énergie (potentiel de Peierls) correspondant (Caillard and Martin, 2003b).	54
Fig. III-17 : Formes de « bosse » critiques à différentes contraintes pour un potentiel de Peierls sinusoïdale (Kocks et al., 1975c). L'extension de la « bosse » en y est plus importante pour les faibles contraintes et nulle dans le cas limite $\tau = \tau_p$. La contrainte est suffisamment élevée comme pour que la partie aval de la bosse n'atteigne pas la vallée de Peierls suivante.	56
Fig. III-18 : Forme de « bosse » critique pour le potentiel de Peierls abrupt (Caillard and Martin, 2003b).	57
Tableau III-7 : Formes analytiques des énergies et aires d'activation dans les approximations à forte contrainte du modèle des double décrochements : potentiels de Peierls dérivables (forme exacte et approximation de faible pente de la bosse) [Fig. III-16] et cas du potentiel abrupt [Fig. III-18] (Caillard and Martin, 2003b).	57
Tableau III-8 : Formes analytiques des énergies et aires d'activation à forte contrainte dans l'approximation à « faible pente de la bosse » [Fig. III-16] : expressions pour les potentiels de Peierls considérés [Fig. III-15 et Tableau III-6] (Caillard and Martin, 2003b). Pour le potentiel d'Eshelby et le sinusoïdal, les expressions sont obtenues après des nouvelles approximations faites pour des contraintes relativement faibles ou fortes (toujours à forte contrainte dans l'approximation $dy/dx \ll 1$).	58
Tableau III-9 : Résumé des approximations et expressions utilisées pour estimer l'énergie d'activation pour le mécanisme des double décrochements dans différents intervalles de contrainte (Caillard and Martin, 2003b).	60
Fig. III-19 : Énergies d'activation en fonction de la contrainte pour le mécanisme de double décrochements (Caillard and Martin, 2003b). On distingue les domaines de validité des approximations à faible et forte contrainte, avec une transition encore débattue.	60
Fig. III-20 : Variation du module de cisaillement dans le fer entre 4 et 300K (Rayne and Chandrasekhar, 1961) 62	
Fig. III-21 : Évaluation de la part de ΔS dans l'énergie d'activation mesurée dans le fer : a) Evolution de ΔG et ΔH avec la contrainte appliquée ; b) évolution de ΔS avec la température et pourcentage de $T\Delta S$ face à ΔG . Les données expérimentales sont issues des travaux de Spitzig et Keh (1970b) et Groh et Conte (1971), et les calculs de ΔS utilisent l'expression (3.69).	63
Fig. III-22 : Schéma de base des paramètres d'une loi de Kocks (3.76) pour ajuster l'énergie d'activation thermique $\Delta G(\tau)$	64
Tableau III-10 : Profils d'obstacles à courte portée décrits par la loi de Kocks (3.76) selon la valeur des paramètres p et q	65
Fig. III-23 : Configuration de bosse critique pour la transformation sessile-glissile (y_c peut être supérieur à h). La dislocation est glissile à $y=0$, mais mobile dans la partie courbe qui s'étale dans son plan de glissement.	67
Fig. III-24 : Transformation d'une dislocation dissociée dans une configuration de plus basse énergie par dissociation dans un autre plan. a) Constriction dans le plan de haute énergie ; b) Configuration seuil ; c) mouvement latéral des deux constriction (Escaig, 1968b, Coulon et al., 1974)	68

Fig. III-25 :	Diagramme énergie-distance pour la transformation sessile-glissile en série (« locking-unlocking »)	68
Tableau III-11 :	Limites de validité des modèles « locking-unlocking » et doubles décrochements.	70
Fig. III-26 :	Représentation schématique des domaines d'existence des différents mécanismes impliqués dans le mouvement des dislocations de cœur non-planaire. On distingue ces domaines à partir des évolutions relatives de la hauteur de l'arc critique pour l'« unlocking » [$y_c(\tau)$] et la distance moyenne de vol avant « locking » [$\bar{y}_g(T)$], pour lesquelles on distingue deux seuils : T_1 est la température minimale pour le mécanisme dd (avec la contrainte τ_1 correspondante), et τ_2 est la contrainte minimale pour le régime de « bosse » ($\tau_2 = \tau_{\min}^{(b)}$ dans le cas d'un mécanisme de doubles décrochements). Les figures (a) à (d) se réfèrent aux différents valeurs relatifs entre τ_1 , τ_2 et $\tau_{\min}^{(b)}$.	70
Fig. III-27 :	Énergie d'activation vs. contrainte correspondant à l'expression (3.50), et montrant la transition entre le mécanisme de doubles décrochements et celui de « locking-unlocking » dans le cas de la Fig. III-26 c) (Caillard and Couret, 2002)	71
Fig. III-28 :	Évolution des paramètres d'activation avec la température dans le fer pur : a) Discontinuité de la variation de la contrainte critique avec la température; b) Discontinuité dans l'aire d'activation et le facteur pré-exponentiel.	72
Fig. III-29 :	Évolution des paramètres d'activation avec la température dans les alliages de fer: a) Influence de l'ajout de Ni dans l'aire d'activation; b) Influence du C sur la contrainte critique.	73
Tableau III-12 :	Analyse du terme pré-exponentiel dans les modèles de Chaussidon et Naamane	74
Tableau III-13 :	Valeurs du facteur de proportionnalité entre v_{vis} et v_{coinv} , K , pour les cinq températures simulées par Naamane dans ses travaux de thèse (2008)	75
Fig. III-30 :	Dépendance en contrainte de la vitesse des dislocations dans le modèle de Chaussidon [2007]	75
Fig. III-31 :	Terme pré-exponentiel dans les modèles de Chaussidon ($L = 1$ et $10 \mu m$) et H&L ($L \rightarrow \infty$)	76
Tableau III-14 :	Paramètres d'ajustement de la Loi de Kocks dans Chaussidon (2007), Libert (2007) et Naamane (2008)	77
Tableau III-15 :	Comparaison des valeurs de τ_0 et ΔH_0 de Chaussidon (2007), Naamane (2008), Libert (2007) avec la littérature. Les valeurs de Chaussidon et Libert ont été obtenues pour de l'acier de cuve 16MND5	78
Tableau III-16 :	Valeurs de τ_0 et T_{at} pour différentes hauteurs de barrière de Peierls dans le modèle H&L.	79
Fig. III-32 :	Évolution de τ_0 avec ΔH_0 dans le modèle H&L	79
Fig. III-33 :	Dépendance en contrainte du ratio entre la loi de Naamane (2008) utilisant l'expression en sinus hyperbolique et celle utilisant l'expression avec l'exponentielle pour une température de 300K. On observe que même à cette température les deux sont de fait identiques dès qu'on s'approche d'une contrainte de 1MPa.	80
Fig. IV-1 :	Analyse de la soudaine augmentation du nombre de segments dislocations dans la simulation de référence de Chaussidon [§3.4.2] : a) Corrélation entre l'évolution du nombre de segments et celle du nombre d'erreurs de recouvrement de segments par pas de calcul avec le code original, et avec la dernière version du code avant la modification du mouvement de segments (« DGR1 »); b) Évolution du temps de calcul dans la simulation avec (« CheckON ») et sans (« CheckOFF ») activer la détection d'erreurs de recouvrement de segments pour le code Tridis BCC original et la dernière version nettoyée qui assure l'identité segment à segment des simulations (« DGR0 »).	91
Tableau IV-1 :	Vecteurs de ligne et directions de glissement des segments des dislocations utilisées dans Tridis BCC. La dénomination de chaque système dans la notation de Schmid et Boas (1950) est notée entre parenthèses.	92
Fig. IV-2 :	Discretisation d'une ligne de dislocation dans les modèles : a) vis-coin ; b) mixte pur, et c) nodal (Shin, 2004)	92

Fig. IV-3 :	Deux cas de figure d'orientation de la force de Peach-Koehler (qui correspond à la trace du Plan de Cission Résolue Maximale) : a) cas du PCRM dans une zone d'anti-maclage ; b) cas du PCRM dans une zone de maclage (Chaussidon, 2007).	94
Fig. IV-4 :	Calcul de la vitesse d'un cran croisé (v_c) dans le code de dynamique de dislocations Tridis-BCC : comparaison entre les expressions utilisées par Chaussidon (2007) et la nouvelle expression continue utilisée dans ces travaux.	95
Fig. IV-5 :	Recombinaison des voisins dans l'interaction avec un segment du plan dévié traversant le plan de glissement.	96
Fig. IV-6 :	Interactions coplanaires gérées dans le code Tridis-BCC original : a) même direction de ligne et même vecteur de Burgers ; b) même direction de ligne mais Burgers opposé ; c) intersection aux extrémités avec une distance à l'obstacle non nulle ; d) et e) Intersections aux extrémités lorsque la distance à l'obstacle est nulle.	97
Fig. IV-7 :	Exemple d'amélioration de la détection de segments obstacles déviés dans Tridis BCC.	98
Fig. IV-8 :	Exemple d'amélioration de l'algorithme de tri d'obstacles dans Tridis BCC: choix des obstacles répulsifs en priorité.	99
Fig. IV-9 :	Modification de l'interaction entre lignes de dislocation répulsives à Tridis BCC.	100
Fig. IV-10 :	Comparaison de l'évolution de la simulation de référence [§2.2] avec les codes DGR0 à DGR3 (voir description dans le corps du texte) : a) Évolution du nombre de segments au cœur de la latte et dans le domaine virtuel ; b) Evolution de la courbure de la latte par rapport à l'asservissement imposé.	102
Tableau IV-2 :	Rapport des temps de calcul avec et sans BLAS pour les fonctions <i>Dgemv</i> et <i>Dnrm2</i> et les compilateurs GNU (g77) et PGI (pgf77), la référence étant la version avec pgf77 sans BLAS (et l'écriture $x*x$ au lieu de $x**2$ dans le cas de <i>Dnrm2</i>).	104
Fig. IV-11 :	Analyse des performances de BLAS en Fortran avec des vecteurs de taille N et des matrices de taille NxN. Les figures a) à d) montrent l'évolution du temps de calcul avec une taille de matrice N croissante pour deux routines (<i>Dgemv</i> et <i>Dnrm2</i>) et deux compilateurs/librairies différents (Gnu et PGI). L'axe des ordonnées représente le ratio du temps de calcul de chaque cas avec celui pour un calcul semblable sans utilisation de BLAS (=1 à égalité de performances). Dans le cas de <i>Dnrm2</i> on analyse en plus la différence entre les expressions $x*x$ et $x**2$ (avec et sans conversion explicite de l'exposant entier) pour le calcul du carré d'un nombre réel sans BLAS [« NB »]. Les routines <i>DnrmD</i> et <i>DgemvD</i> sont des routines programmées sans BLAS pour analyser l'impact du coût d'appel à la routine.	105
Fig. IV-12 :	Illustration du principe de la méthode des boîtes originale de Tridis pour le calcul de la contrainte interne à longue portée. D'une part, on considère que la distance entre un segment et les boîtes lointaines est très proche de celle entre le segment et le centre de la boîte lointaine (~ multi-pôle aux sources). D'autre part, on considère que la contribution des segments lointains n'évolue pas rapidement, et qu'il n'est nécessaire de l'actualiser que tous les <i>nupdateLR</i> pas de calcul.	106
Fig. IV-13 :	Schéma de principe du calcul du champ de contrainte d'un segment fini à partir de la formule de Li (1964). On calcule la contrainte d'un segment fini en un point comme la soustraction du champ de contrainte en ce point de deux segments semi-infinis.	107
Fig. IV-14 :	Approximations dans la nouvelle méthode des boîtes. On calcule d'abord le tenseur de Nye M pour chaque boîte source BS (ne dépend que des segments contenus dans la boîte), puis on obtient sa contribution sur les boîtes cibles BC comme une combinaison linéaire qui n'implique que les composantes de r_{B1B2} (joignant le centre des boîtes) et les coefficients de M.	108
Fig. IV-15 :	Comparaison entre la nouvelle approximation et la formule exacte de Li (1964) pour le calcul de la contrainte d'un segment à longue portée (cas générale). Le graphique montre le ratio entre la valeur de la contrainte selon chaque formule et la valeur de $1/r^2$ lorsqu'on s'éloigne de l'origine selon la direction [111]. On constate ainsi la décroissance $1/r^2$	109
Fig. IV-16 :	Comparaison entre la nouvelle approximation et la formule exacte de Li (1964) pour le calcul de la contrainte d'un segment à longue portée (cas le plus pénalisant). Le graphique montre le ratio entre la valeur de la contrainte selon chaque formule et la valeur de $1/r^2$. On constate comment dans des	

- cas particuliers, la nouvelle approximation est particulièrement mauvaise. Cependant, les termes négligés décroissent bien plus vite que $1/r^2$ et sont localisés dans des directions très précises. 109
- Fig. IV-17 : Cartographies de l'erreur associée à la nouvelle méthode des boîtes pour le calcul à longue portée de la contrainte interne des segments dans Tridis [Fig. IV-14]. On calcule la contrainte créée par une dislocation qui traverse le domaine de simulation au point milieu de chacune des boîtes dans un plan $z = \text{cte}$ (30x30 boîtes). Les valeurs ainsi calculées sont comparées aux résultats en utilisant la formule exacte de Li (1964). a) montre l'erreur associée à l'approximation en L/r^2 (NMB1); b) montre l'erreur totale de la nouvelle méthode des boîtes, qui comprend une approximation monopôle aux sources additionnelle (NMB2). 110
- Fig. IV-18 : Comparaison des performances entre le code « original » Tridis BCC et les versions DGR0 et DGR2 : a) évolution du ratio du temps de calcul par segment et du nombre de segments ; b) évolution de la flexion dans la latte (composante 2,1 du tenseur de Nye dans le sens de la sollicitation) 112
- Tableau IV-3 : Comparaison des performances entre le code « original » Tridis-BCC et les versions DGR0 et DGR2 : temps de calcul (heures) en fin de simulation à 3600 pas (avant le fort incrément du nombre de segments dans la simulation) et 4300 pas (en fin de simulation). On distingue ici le temps utilisé pour le calcul des contraintes de celui pour le mouvement des segments, qui constituent à eux deux plus de 99% du temps de calcul. 112
- Fig. IV-19 : Gain en performances en utilisant la nouvelle méthode des boîtes (« NMB », [§3.3.2]) pour le calcul des contraintes à longue portée : a) Évolution du ratio des temps de calcul par pas globaux entre la NMB et la méthode des boîtes originale de Tridis (« MBO », §3.3.1) ; simulations effectuée avec 10^3 et 20^3 boîtes. b) Temps de calcul de la contrainte à longue portée en fonction du nombre de segments pour les deux méthodes. 113
- Tableau IV-4 : Gain en performances dans le calcul des contraintes à longue portée par la nouvelle méthode des boîtes (« NMB », [§3.3.2]) par rapport à la méthode des boîtes originale à Tridis (« MBO », §3.3.1) : détail du temps de calcul en fin de simulation (7000 pas ou $7 \mu\text{s}$) avec 10^3 et 20^3 boîtes. 114
- Fig. IV-20 : Gain en performances en utilisant la nouvelle méthode des boîtes (« NMB », [§3.3.2]) pour le calcul des contraintes à longue portée : simulations sans approximation temporelle [§3.3.1] (i.e. $\text{nupdateLR} = 1$). a) ratio des temps de calcul globaux par rapport à l'utilisation de la méthode des boîtes originale à Tridis (« MBO », §3.3.1) avec $\text{nupdateLR}=10$; b) Évolution du temps de calcul global avec les deux méthodes pour 10 boîtes avec une actualisation de la contrainte à longue portée tous les 10 pas de temps, et 20 boîtes sans approximation temporelle. 114
- Tableau V-1 : Paramètres d'ajustement par une loi de Kocks de l'énergie d'activation pour la mobilité thermiquement activée des dislocations vis dans le fer CC : comparaison du nouvel ajustement à partir des mesures de la limite d'élasticité sur des monocristaux de fer [§B-5] avec ceux utilisés dans les études précédents en dynamique de dislocations [§III-3.6.3]. 122
- Fig. V-1 : Annihilation de doubles décrochements après un libre parcours moyen λ [§III-3.2.3] 123
- Fig. V-2 : Mobilité en fonction de la longueur de la dislocation vis (L), selon le modèle de Hirth et Lothe (1982) : a) variation avec la contrainte à $T=200\text{K}$: on évalue le ratio entre la vitesse pour une dislocation de longueur $L < L_{\text{max}}$ avec une longueur de référence ($L_{\text{max}} \approx 25 \mu\text{m}$). b) effet de la température : on évalue pour différentes températures le ratio des vitesses entre deux dislocations dont la longueur diffère d'un ordre de grandeur pour $\tau < \tau_0$ 125
- Fig. V-3 : Mobilité des dislocations vis dans le fer CC : comparaison entre le nouveau modèle basé sur H&L [§2.2.2], celui de Chaussidon (CH), et celui de Naamane (NA) [§III-3.6]. Analyse pour trois longueurs L de dislocation à $T=200\text{K}$ et en utilisant les mêmes valeurs de B et $\Delta G(\tau)$ dans les trois cas. a) échelle linéaire ; b) échelle logarithmique. 126
- Fig. V-4 : Mobilité des dislocations vis dans le fer CC à 298K : comparaison entre les mesures expérimentales d'Urabe et Weertman (1975) et les prédictions du nouveau modèle basé sur l'analyse de Hirth et Lothe [§2.2.2]. 127
- Fig. V-5 : Comparaison de la mobilité des dislocations vis dans le fer CC selon le nouveau modèle hybride H&L-G&D [§2.3.1] et celui de Chaussidon (CH) [§III-3.6]. Analyse à $T=200\text{K}$ pour les longueurs minimum [$L_{\text{min}}=50\text{nm}$] et maximum [$L_{\text{max}}=25 \mu\text{m}$] dans la boîte de simulation : a) échelle linéaire ; b) échelle logarithmique. 128

Fig. V-6 :	Mobilité des dislocations vis dans le fer CC : comparaison entre le nouveau modèle hybride H&L-G&D [§2.3.1] et le modèle H&L[§2.3.1]. Les valeurs de B_{vis} et B_{coin} dans le courbes athermiques expérimentales sont issus des travaux d'Urabe et Weertman (1975) [§III-2.4.1]. Analyse à $T=298K$ pour les longueurs minimum [$L_{min}=50nm$] et maximum [$L_{max}=25\mu m$] dans la boîte de simulation : a) échelle linéaire ; b) échelle logarithmique.	129
Fig. V-7 :	Observations de dislocations dans du Fer pur en MET in-situ à 300K (a) et 110K (b) (Caillard, 2009)	131
Fig. V-8 :	Comparaison de la mobilité des dislocations coin et vis dans le fer CC à 350K. La vitesse des coin obéit au modèle de friction visqueuse avec $B=3,4 \cdot 10^{-4} Pa.s$ [valeur obtenue à 300K par Urabe et Weertman (1975)]. Pour les vis on utilise le modèle hybride H&L-G&D [§2.3] avec α_{corr} ajustée pour $v_{vis} = v_{coin}$ dans le régime athermique. On souligne l'écart très important entre les mobilités à faible contrainte, et tout particulièrement à 1MPa.	132
Fig. V-9 :	Valeurs de $\tau^*(T)$ utilisés dans l'ajustement de l'expression (5.15), déduits à partir de ceux de $\tau_y(T)$ relevés en fin de stade 0 par Naamane (2008) à partir des mesures expérimentales de Kuramoto et al. (1979) sur des monocristaux de fer.	135
Tableau	V-2 : Comparaison entre les deux meilleurs jeux de paramètres de (5.15) ajustés à partir des mesures de $\tau_y(T)$ sur des monocristaux de fer par Kuramoto et al. (1979) [Fig. V-9], et ceux obtenus pour la loi de Kocks [Tableau V-1].	135
Fig. V-10 :	Effet du modèle (ΔG) sur la mobilité des dislocations vis dans le fer CC [modèle hybride H&L-G&D, §2.3]: a) $\Delta G(\tau)$ selon une loi de Kocks (3.76) ; b) $\Delta G(\tau, T)$ selon l'équation (5.15).	136
Fig. V-11 :	Effet du modèle (ΔG) sur la dépendance en la longueur de la dislocation (L) de la mobilité des vis dans le modèle hybride H&L-G&D [§2.3]. Évolution en contrainte et température du ratio des vitesses entre deux dislocations dont la longueur diffère d'un ordre de grandeur ($L_{max} \approx 25\mu m$) avec ΔG : a) selon une loi de Kocks (3.76) b) selon l'équation (5.15).	136
Fig. V-12 :	Effet du modèle (ΔG) sur la mobilité des dislocations vis dans le fer CC à 298K : comparaison avec les mesures expérimentales d'Urabe et Weertman (1975) et les prédictions des modèles introduits au paragraphe §2 : a) H&L [§2.2]; b) hybride H&L-G&D (noté « HL-GD ») [§2.3]. L'utilisation de $\Delta G(\tau)$ selon la loi de Kocks (3.76) est dénotée par « K », tandis que l'utilisation de l'expression de $\Delta G(\tau, T)$ (5.15) est dénotée par « Kmod ».	137
Fig. V-13 :	Effet du modèle (ΔG) sur la mobilité des dislocations vis dans le fer CC : comparaison avec les sauts de vitesse et température réalisés par Keh et Nakada (1968). Le tableau rapporte les vitesses prédites par chacun des modèles, par rapport au niveau de contrainte imposée de base.	138
Fig. V-14 :	Effet du modèle (ΔG) sur la mobilité des dislocations vis dans le fer CC : comparaison avec les sauts de vitesse et de température réalisées par Arsenault (1964). Le tableau de droite rapporte les vitesses prédites par chacun des modèles, par rapport au niveau de contrainte imposée de base.	139
Fig. V-15 :	a) Détermination expérimentale de l'entropie d'activation ΔS , nécessitant mesure de la variation de ΔG avec la température à contrainte constante [(Kocks et al., 1975a), Fig. 41-4b] : b) Représentation schématisée du domaine habituellement explorée lors des essais utilisés pour mesurer les paramètres d'activation (Conrad and Wiedersich, 1960)	140
Fig. V-16 :	Schéma de principe : activation thermique et contribution entropique. Le cas à 0K (a) correspond au traitement traditionnel, où la contribution de $T\Delta S$ est nulle, la hauteur effective de la barrière est ΔH_0 et la contrainte critique pour la franchir est $\tau_c = \tau_0$. Dans une situation intermédiaire (b) le terme entropique abaisse la hauteur de la barrière à contrainte nulle, et donc la contrainte τ_c qui lui est associée. A la température athermique (c) la hauteur de la barrière est nulle pour une contrainte τ_c qui tend vers zéro.	141
Fig. V-17 :	Schéma comparatif d'évolution de l'énergie d'activation ΔG avec la contrainte et la température selon les expressions (5.15) et (5.20).	142
Fig. V-18 :	Courbes de traction simulées avec Tridis BCC : a) évolution de la cisssion appliquée sur le système pour une vitesse de déformation de 40 s-1 pour des températures entre 50K et 300K ; b) Comparaison avec les mesures expérimentales de $\tau_y(T)$ de Kuramoto et al. (1979) ayant servi pour l'ajustement de la loi [§3.3.3].	144

Fig. V-19 :	Microstructures de dislocations déformées en cisaillement simple à contrainte imposée : a) 33MPa à 300K ; b) 160 MPa à 110K. La configuration est similaire à celle utilisée dans l'étude de la contrainte d'écoulement mais avec un nombre réduit de sources initiales.	145
Fig. V-20 :	Réponses en traction à des sauts de vitesse de déformation entre 20 s^{-1} et 200 s^{-1} : a) courbes de traction simulées ; b) comparaison de la sensibilité de la contrainte à la vitesse de déformation avec les mesures expérimentales réalisées par Nakada et Keh (1968). Les valeurs des simulations sont calculées comme la moyenne des sauts en écartant les premiers de chaque série ; c) évolution de la densité des dislocations à 100K.	146
Fig. V-21 :	Angle de glissement moyen ψ d'une dislocation vis en fonction de l'orientation χ du PCRM à 77K (a) et 295K (b) sur un alliage CC Nb at. 5%Mo (Christian, 1983)	147
Fig. V-22 :	Configuration initiale des simulations pour illustrer l'asymétrie du glissement dévié dans les régions de maclage et anti-maclage dans le fer CC (version à 77K).	148
Fig. V-23 :	Illustration de l'asymétrie du glissement dévié à basse température dans le fer CC : a) Observations expérimentales de Sestak et Libovicky (1963) ; b) simulation avec le code de dynamique de dislocations Tridis BCC.	149
Fig. V-24 :	Déformation d'une latte de fer CC en flexion à haute température (293K) : a) Observations expérimentales de Sestak et Libovicky (1963) ; b) et c) Simulation avec le code de dynamique de dislocations Tridis-BCC	149
Fig. V-25 :	Distribution des contraintes résolues sur les 3 plans de clivage : normale à (100) $\diamond$, normale à (010) $\bullet$, et normale à (001) $\square$, pour 50K (a) et 200K (b) (Chaussidon, 2007, 2010).	150
Fig. V-26 :	Simulations utilisées pour le calcul de l'évolution de la contrainte interne dans une latte de ferrite sollicitée en flexion : a) Configuration initiale des sources de dislocations dans le domaine virtuel ; b) Localisation des sites de calcul pour l'analyse de l'évolution de la contrainte avec le temps sur l'épaisseur de la latte : cinq lignes de dix points traversant la latte et disposées aux sites marqués dans la figure sont analysées.	151
Tableau V-3 :	Contrainte maximale résolue sur un plan de clivage relevée pour chacune des simulations.	151
Fig. V-27 :	Évolutions de la contrainte résolue (σ^*) sur les plans de clivage (001) et (100), à 50K et 200K en fonction de la courbure plastique, avec la loi de mobilité (NL2) et (NL1). Nous représentons ici l'évolution de la valeur moyenne de tous les points de calcul, normalisée par rapport à la contrainte maximale obtenue dans ces plans pour chaque simulation, soit le maximum de $\sigma^*_{(001)}$ [Tableau V-3].	152
Fig. V-28 :	Évolution de la contrainte résolue (σ^*) sur les plans de clivage (001) et (100) à 50K et 200K en fonction de la courbure plastique. Nous représentons ici l'évolution de la valeur moyenne de tous les points de calcul, normalisée par rapport à la contrainte maximale obtenue dans ces plans dans chaque simulation, soit le maximum de $\sigma^*_{(001)}$ [Tableau V-3].	153
Fig. V-29 :	Microstructure développée dans la latte pour une courbure plastique de 600 m^{-1} en utilisant la loi de mobilité e (NL2) : a) à 50K, b) à 200K, en séparant la famille de systèmes de vecteur de Burgers [-1-1 1] (b1) de celle de vecteur de Burgers [-1 1-1] (b2)	153

(annexes)

Tableau A-1 : Défauts d'irradiation observés par SANS dans des aciers de cuve à différentes teneurs en Cu [Bergner 2008]. On montre la nature des défauts, sa densité et distribution de taille (mode et rayon maximal) pour deux conditions d'irradiation différentes (0,01dpa à $4 \cdot 10^{-10}$ dpa/s et 0,09 dpa à $3 \cdot 10^{-9}$ dpa/s).	175
Tableau A-2 : Observation des défauts d'irradiation dans les alliages ferritiques par PAS (Lambrecht and Almazouzi, 2007a).	177
Tableau A-3 : Schéma de principe illustrant l'effet de la température, la teneur en carbone (C) et la dose, sur les boucles SIA observées au MET dans le Fe- α (Meslin et al., 2007)	179
Tableau A-4 : Comparaison des différentes études MET récentes (2000-2007) sur les défauts d'irradiation dans les alliages ferritiques et le Fe- α . On précise les conditions d'irradiation neutronique (n), ou ionique (Ni^{2+} , Fe^{2+} et Kr^{2+}), ainsi que les caractéristiques des défauts observées. Pour plus de détails voir plus haut dans le texte.	180
Fig. A-1 : Analyse DM de la contrainte de franchissement de défauts d'irradiation par des dislocations coin dans le CC (Bacon and Osetsky, 2007). a) Comparaison entre les résultats DM (cercles vides : cavités dans le Fe ; cercles noirs : précipités de Cu dans le Fe ; triangles vides : cavités dans le Cu) et les prédictions d'un model de durcissement continu (Scattergood and Bacon, 1982) ; b) Effet de la température sur le durcissement des vides de $D = 2$ nm et des précipités de Cu dans le Fe.	183
Tableau A-5 : contrainte critique pour le désencrage des dislocations à l'encontre des boucles de dislocation ...	184
Fig. A-2 : Visualisation du glissement spontané et la transformation d'une boucle 331-SIA dans le Fer à 300 K. Un segment [010] s'est formé à (b), puis glisse au fur et à mesure que les bras coin glissent vers le bas à (c) et (d) (Bacon et al., 2006).	184
Fig. A-3 : Types d'interactions possibles entre une dislocation coin dans le fer CC et une boucle de SIA de vecteur de Burgers $b = \frac{1}{2}\langle 100 \rangle$ observées en DM (Terentyev et al., 2008b) en utilisant le potentiel d'Ackland et al. (2004). Les codes de chaque figure se correspondent à ceux utilisés par Terentyev et al. pour identifier les différents cas de figure.	185
Tableau A-6 : Interaction en DM entre une dislocation coin et une boucle de SIA avec $b = \langle 100 \rangle$ dans le fer CC : mécanisme, contrainte critique, niveau d'absorption, et reste de la réaction (Terentyev et al., 2008b). (ref : codes utilisés par Terentyev et al.)	186
Fig. A-4 : Comparaison entre la force d'ancrage obtenue en DM par Terentyev et al. (2008b) pour une dislocation coin dans le fer CC traversant différents obstacles (boucles avec $b = \langle 100 \rangle$, avec $b = \frac{1}{2}\langle 111 \rangle$ et cavités nanométriques). Les points en croix ont été calculés à partir de l'équation (A.1).	187
Fig. A-5 : Mécanismes d'interaction dans le fer CC entre une dislocation vis et une boucle de SIA de vecteur de Burgers $b = \frac{1}{2}\langle 111 \rangle$ sous deux points de vue (Liu and Biner, 2008) : a) boucle de 1.6nm de diamètre ; b) boucle de 3nm de diamètre.	188
Tableau A-7 : Interaction dans le fer CC entre une dislocation vis et une boucle de SIA de vecteur de Burgers $b = \frac{1}{2}\langle 111 \rangle$ étudiée par DM (Liu and Biner, 2008): Contrainte critique (τ_c) et force d'ancrage dans le modèle d'Orowan (α).	189
Fig. A-6 : Types d'interactions possibles entre une dislocation vis dans le fer CC et une boucle de SIA de vecteur de Burgers $b = \langle 100 \rangle$ observées en DM (Terentyev et al., 2009). (ref : codes utilisés par Terentyev et al. pour identifier chaque cas).	189
Tableau A-8 : Interaction en DM entre une dislocation vis et une boucle de SIA avec $b = \langle 100 \rangle$ pour trois températures dans le fer CC : contrainte critique, et reste de la réaction (Terentyev et al., 2009). (ref : codes utilisés par Terentyev et al.)	190
Fig. A-7 : Comparaison entre la force d'ancrage obtenue en DM pour une dislocation vis dans le fer CC traversant des boucles de dislocation de vecteur de Burgers $\langle 100 \rangle$ et $\frac{1}{2}\langle 111 \rangle$ pour différentes températures (Terentyev et al., 2009). Les valeurs obtenus pour les boucles à 1275K sont issus des travaux de Liu et Biner (2008).	191

Fig. A-8 :	Influence de l'irradiation aux neutrons sur le comportement mécanique en traction de l'acier de cuve à température ambiante: (a) en unités d'ingénieur après irradiation en réacteur (Hausild et al., 2005); (b) en unités vraies après irradiation à 80°C, et avec un décalage selon l'axe des abscisses jusqu'à atteindre un même niveau de contrainte (Byun et al., 2008).	192
Fig. A-9 :	Cartographie des modes de déformation à température ambiante en fonction de la dose pour l'acier de cuve A533B irradié à 80°C (Byun, 2007)	193
Fig. A-10 :	Essais de traction sur des monocristaux de Fer pur irradié par neutrons à 5K (Kitajima et al., 1982): a) Limite d'élasticité à 4, 20, 64 et 90K; b) Dépendance angulaire de la limite d'élasticité à 4K et 90K.	194
Fig. A-11 :	Impact de l'irradiation sur la ténacité de l'acier de cuve : a) essais de Charpy après irradiation en milieu réacteur (Hausild et al., 2005); b) influence de la température d'irradiation et dose (Lemaignan, 2004).	195
Fig. A-12 :	Décalage de la température de transition ductile-fragile (TTDF) avec l'irradiation dans l'acier de cuve ; comparaison avec le trajet de chargement K_I lors d'un refroidissement d'urgence du cœur en situation d'APRP.	196
Fig. A-13 :	Comparaison entre les valeurs de ΔRT_{NDT} obtenus avec les formules FIS et NUREG 1.99 Rev1 (Lemaignan, 2004)	196
Fig. B-1 :	Ajustement de $\Delta G(\tau)$ à partir des valeurs de $\tau_y(T)$ mesurées sur des monocristaux de fer par Spitzig et Keh (1970a), Quesnel et al. (1975), et Kuramoto et al. (1979). Les points expérimentaux utilisés sont ceux relevés par Naamane au stade 0. Pour l'ajustement, on utilise la formule (B.2) avec $T_{at} = 293K$	205
Tableau B-1 :	Paramètres et qualité de l'ajustement de $\Delta G(\tau^*)$ à partir de mesures $\tau_y(T)$ pour les monocristaux de fer [Fig. B-1]. Les bornes de confiance à 95% sont notées entre parenthèses.	205
Fig. B-2 :	Ajustement de $\Delta G(\tau)$ à partir des valeurs de $d\tau_y / dT$ calculées selon (B.6) pour des mesures de $\tau_y(T)$ sur des monocristaux de fer (Spitzig and Keh, 1970a, Quesnel et al., 1975, Kuramoto et al., 1979). Les points expérimentaux utilisés sont ceux relevés par Naamane au stade 0. Pour l'ajustement nous utilisons la formule (B.5) avec : toutes les données confondues (« Tous_mix »), toutes les données séparées par séries (« Tous_série »), et seulement la série de Kuramoto et al. 1979 (« Kuramoto »).	206
Tableau B-2 :	Paramètres et qualité de l'ajustement de $\Delta G(\tau)$ à partir des valeurs de $d\tau_y / dT$ calculés pour les monocristaux de fer [Fig. B-2]. Les bornes de confiance à 95% sont notées entre parenthèses.	206
Fig. B-3 :	Ajustement de $\Delta G(\tau)$ à partir des valeurs de $\tau_y(T)$ pour l'acier 16MND5 mesurées au SRMA pour une vitesse de déformation de 0.5 s^{-1} . On utilise la formule (B.2) avec $T_{at} = 293K$, τ_0 étant soit libre soit fixée à 360 MPa.	207
Tableau B-3 :	Paramètres et qualité de l'ajustement de $\Delta G(\tau)$ à partir de mesures $\tau_y(T)$ pour l'acier 16MND5 [Fig. B-3]. On utilise la formule (B.2) avec $T_{at} = 293K$, τ_0 étant soit libre soit fixée à 360 MPa. Les bornes de confiance à 95% sont notées entre parenthèses.	207
Fig. B-4 :	Ajustement de $\Delta G(\tau)$ à partir des valeurs de $d\tau_y / dT$ calculées selon (B.6) pour l'acier 16MND5. On utilise la formule (B.5) en rajoutant une constante B proche de 0,12 MPa/K [cf. eq. (B.8)]. Deux séries de données sont utilisées : toutes celles disponibles avec $\dot{\epsilon} = 0.5$ (τ_0 étant soit libre soit fixée à 360 MPa), et seulement celles du coupon 262-M3 (τ_0 étant libre).	208
Tableau B-4 :	Paramètres et qualité de l'ajustement de $\Delta G(\tau)$ à partir des valeurs de $d\tau_y / dT$ pour l'acier 16MND5 [Fig. B-4]. On utilise la formule (B.5) en rajoutant une constante proche de 0,12. Les bornes de confiance à 95% sont notées entre parenthèses.	208
Fig. B-5 :	Comparaison entre la composante thermiquement activée des mesures expérimentales de la cisssion résolue critique en fonction de la température pour l'acier 16MND5 et les monocristaux de fer pur. Pour les monocristaux, on utilise la contrainte critique au stade 0, alors que pour la bainite la contrainte relevée est la limite d'élasticité traditionnelle à 0,2% de déformation corrigée du facteur de Taylor $M = 0,3$	209

Fig. B-6 :	Évolution de l'énergie d'activation avec la contrainte effective en utilisant les meilleurs ajustements par une loi de Kocks (B.1) obtenus pour la bainite et les monocristaux de fer à partir des mesures de τ_y (« abs ») et des valeurs de $d\tau_y/dT$ (« der »). Les valeurs des paramètres dans chaque cas sont recueillies dans le Tableau B-5.	210
Tableau B-5 :	Résumé des meilleurs ajustements obtenus pour les monocristaux de fer et la bainite en utilisant les données de τ_y et $d\tau_y/dT$ [Fig. B-6]. Celui retenu pour la suite de ces travaux est signalé en vert [« MonoC. ($d\tau_y/dT$)- Tous_mix »]. Les valeurs obtenues par Naamane sur les monocristaux à partir de τ_y sont données pour comparaison.	210
Fig. C-1 :	Exemple de structure de données dans le code Tridis-CC. Dans Tridis on découpe l'espace de simulation en boîtes pour accélérer le calcul des contraintes internes (voir la section sur la « méthode des boîtes » [§IV-3.3]). ISBOX s'utilise pour repérer à chaque pas de temps tous les segments présents sur chacune de ces boîtes.	214
Fig. C-2 :	Exemple de commentaires sur une entête du code Tridis CC : a) version précédente ; b) dernière version	215
Fig. C-3 :	Exemple de déclaration des variables sur une routine du code Tridis CC : a) version précédente avec déclaration implicite : la majorité des variables ne sont pas déclarées ; bool2 est déclarée mais pas utilisée ; b) dernière version : déclaration explicite de toutes les variables.....	216
Fig. C-4 :	Modification de la structure d'initialisation de Tridis. On est passé d'une structure avec une initialisation dispersée sur plusieurs routines à une structure avec une routine mère qui regroupe l'ensemble des initialisations réalisées en détail par des routines filles spécifiques.	218
Fig. D-1 :	Évolutions en fonctions de la courbure en flexion de la latte de la contrainte résolue (σ^*) sur les plans de clivage (001) et (100), à 50K et 200K, avec la loi de mobilité des vis qui intègre un terme entropique (NL2) et celle qui n'en a pas (NL1). Nous comparons l'influence de la loi de mobilité pour chaque température.	221
Fig. D-2 :	Évolutions en fonctions de la courbure en flexion de la latte de la contrainte résolue (σ^*) sur les plans de clivage (001) et (100), à 50K et 200K, avec la loi de mobilité des vis qui intègre un terme entropique (NL2) et celle qui n'en a pas (NL1). Nous comparons ici le changement avec la température pour chacune des deux lois de mobilité.	222