



Aix-MARSEILLE UNIVERSITÉ

CEA Cadarache

École Doctorale 353

Laboratoire de Mécanique et d'Acoustique de Marseille

Laboratoire de Simulation du Combustible

Thèse présentée pour obtenir le grade universitaire de docteur

Discipline : Science pour l'ingénieur : Mécanique, Physique, Micro et
Nanoélectronique

Spécialité : Mécanique des solides

Luc PORTELETTE

**Analyse des mécanismes de glissement des dislocations
dans l' UO_2 à l'aide de la modélisation multi-échelles
comparée à l'expérience**

Soutenue le 10 octobre 2018 devant le jury :

Frédéric LEBON	Aix-Marseille Université	Président
Laurent DELANNAY	Université catholique de Louvain	Rapporteur
Marc FIVEL	SIMAP, Grenoble INP	Rapporteur
Céline GERARD	Institut Pprime	Examinatrice
Rodrigue LARGENTON	EDF	Examineur
Bruno MICHEL	CEA Cadarache	Directeur de thèse
Ronan MADEC	CEA	Invité
Jonathan AMODEO	Laboratoire MATEIS, INSA Lyon	Invité

Numéro national de thèse/suffixe local : 2018AIXM0406/025ED353

Remerciement

La thèse que je présente dans ce manuscrit a été réalisée au CEA de Cadarache au Laboratoire de Simulation des combustibles (LSC) et en collaboration avec le Laboratoire de Mécanique et d'Acoustique (LMA) à Marseille.

Je tiens tout d'abord à remercier les membres de mon jury, Monsieur Laurent DELANNAY, Monsieur Marc FIVEL, Madame Céline GERARD, Monsieur Rodrigue LARGENTON et Monsieur Frédéric LEBON pour l'intérêt qu'ils ont porté à mes travaux et pour avoir accepté de juger ce travail.

Je tiens à remercier très particulièrement Bruno MICHEL, mon directeur de thèse et encadrant, qui m'a guidé tout au long de ces trois années et avec qui j'ai pris plaisir à travailler. Je le remercie pour sa disponibilité, son implication et pour tout ce qu'il m'a apporté pour réussir cette thèse.

Toute ma gratitude va également vers Ronan MADEC et Jonathan AMODEO avec qui j'ai collaboré au cours de ma thèse. Ils m'ont apporté beaucoup de connaissances et m'ont consacré beaucoup de leur temps. Ils ont sans aucun doute contribué à une certaine qualité de mes travaux sur les dislocations, les monocristaux et les interactions entre dislocations.

Je remercie très chaleureusement Akram EL ABDI, Etienne CASTELIER, Marcelle IBRAHIM, Thomas HELFER pour leur contribution, leur aide et leurs conseils m'ayant permis un travail efficace et complet en grande partie sur la simulation des polycristaux.

Un grand merci à Mariem BEN SAADA, Xavière ILTIS et Philippe GARCIA pour avoir partagé des résultats expérimentaux d'essais de compression sur pastille avec mesure EBSD qui constitue un atout majeur pour la validation des simulations réalisées sur polycristaux.

Je suis également très reconnaissant auprès de l'ensemble des personnes du LSC, du Service, d'Etude et de Simulation des Combustibles (SESC) et des autres services du Département d'Etude des Combustibles (DEC) pour les échanges, les aides apportés et l'accueil qu'il m'ont fait.

J'aimerais remercier également mes collègues et amis thésards à commencer par Thomas CATTEROU avec qui j'ai partagé mon bureau mais également avec qui j'ai échangé tout au long sur mes travaux. Je cite également Jules, Joane, Karl, Piotr, Daria, Lokesh, Marie, Veronica et beaucoup d'autres avec qui j'ai passé de supers moments au travail et en dehors.

Mes amis sont également les premiers à me soutenir depuis de nombreuses années donc Cécile, Laurent, Arthur, Cyril, Téo ainsi que tous mes amis du « sud » et de Saint - Etienne merci d'être toujours là.

Je remercie mon épouse Margarita qui me soutiens tous les jours quand je suis content de moi mais surtout quand je me plains et quand je remets toute ma vie en question. Merci pour tout ce que tu fais et a fait pour moi et merci de me comprendre.

Finalement, je remercie ma famille, mes frères et sœurs qui ont toujours été source d'inspiration pour moi et surtout mes parents qui m'ont laissé choisir mon parcours et fait en sorte que ça se réalise avec un soutien constant.

Merci, Merci et encore merci.

Abréviations :

REP	Réacteur à Eau Pressurisée
UO ₂	Dioxyde d'uranium
IPG	Interaction Pastille-Gaine
CaF ₂	Fluorure de calcium
BaF ₂	Barium fluoride
ThO ₂	Dioxyde de Thorium
CFC	Cubique à Face Centrée
CC	Cubique Centré
CRSS	Critical Resolved Shear Stress
MRSSP	Maximum Resolved Shear Stress Plane
MET	Microscopie Électronique en Transmission
EF	Éléments Finis
HPP	Hypothèse des Petites Perturbations
FPI	Figure de Pole Inverse
CA	Compression Axis
DD	Dynamique des Dislocations
CLPs	Conditions aux Limites Périodiques
SE	Sans Écrouissage
AE	Avec Écrouissage
GNDs	Geometrically Necessary Dislocations
JdG	Joint de Grains
S-JdG	Sous-Joint de Grains
VER	Volume Élémentaire Représentatif
Accurate-ECCI	Accurate-Electron Channeling Contrast Imaging
RIA	Reactivity Initiated Accident

Tables des Matières

1.	<i>Introduction</i>	11
1.1.	Enjeux industriels	11
1.2.	Objectif de la thèse	15
2.	<i>État de l'art : viscoplasticité des pastilles combustibles</i>	17
2.1.	Deux mécanismes viscoplastiques	18
2.2.	Couplage des mécanismes	19
2.3.	Dépendance à la taille de grain	23
2.4.	Autres paramètres	24
2.4.1.	Effet de la stoechiométrie	24
2.4.2.	Effet de la porosité	24
2.5.	Description du mécanisme de viscoplasticité par glissement des dislocations	25
2.5.1.	Rappels sur les dislocations	25
2.5.2.	Dislocations dans l'UO ₂	32
2.6.	Positionnement de la thèse	37
3.	<i>Comportement viscoplastique du monocristal d'UO₂</i>	41
3.1.	Formulation du comportement non linéaire local	42
3.1.1.	Méthode éléments finis	42
3.1.2.	Modèle de plasticité cristalline de l'UO ₂	43
3.1.3.	Récapitulatif des équations constitutives du modèle	48
3.2.	Identification des paramètres du modèle	49
3.2.1.	Méthode d'ajustement des paramètres	49
3.2.2.	Détails des données exploitables	50
3.2.3.	Résultats de l'ajustement des paramètres du modèle	55
3.3.	Simulation éléments finis des essais de compression sur monocristaux	58
3.3.1.	Description des essais de référence	58
3.3.2.	Méthodologie des simulations EF	61
3.3.3.	Résultats des simulations EF	64
3.3.4.	Discussions et analyses	73
3.4.	Conclusions	77
4.	<i>Interactions des dislocations</i>	81
4.1.	Motivation	82
4.2.	Effet durcissant des interactions entre dislocations	84
4.2.1.	Mécanisme de multiplication de Frank-Read	84
4.2.2.	Modèle de stockage-restauration	85
4.2.3.	Formation de jonction	88

4.2.4.	Approximation isotrope de l'anisotropie élastique	90
4.2.5.	Matrice d'interaction de l' UO_2	93
4.3.	Dynamique des dislocations	96
4.3.1.	Discrétisation de l'espace	96
4.3.2.	Discrétisation des lignes de dislocation	97
4.3.3.	Mobilité des dislocations	98
4.3.4.	Calcul des interactions	98
4.4.	Interactions des dislocations à l'aide de la DD	100
4.4.1.	Cartographie des réactions	100
4.4.2.	Calcul des coefficients	107
4.4.3.	Conclusions	115
4.5.	Effet de l'interaction des dislocations sur l'érouissage et l'activation des systèmes de glissement dans l'UO_2	117
4.5.1.	Intégration dans le modèle	117
4.5.2.	Simulations EF avec érouissage	121
4.5.3.	Conclusions et discussions	134
4.6.	Conclusions	135
5.	Polycristaux d'UO_2	137
5.1.	Motivation	138
5.2.	Méthode de simulation EF des polycristaux et comparaison avec l'expérience	138
5.2.1.	Génération du maillage polycristallin	139
5.2.2.	Choix du nombre de grain du polycristal	142
5.2.3.	Durcissement par interactions de dislocations dans un polycristal	144
5.2.4.	Calcul des GNDs par éléments finis	146
5.2.5.	Modification du durcissement induit par une répartition continue des ρ_{GND}	151
5.2.6.	Méthode de comparaison calcul-mesure de la courbure du réseau cristallin	156
5.2.7.	Essais de référence et méthode de comparaison simulation-expérience	157
5.3.	Résultats	163
5.3.1.	Choix du nombre de grain du polycristal	163
5.3.2.	Sensibilité de la contrainte au raffinement de maillage	165
5.3.3.	Sensibilité de la vitesse de déformation à la contrainte et à la température	166
5.3.4.	Validation du calcul des GNDs	171
5.4.	Discussions	177
5.4.1.	Sensibilité de la vitesse de déformation à la contrainte et à la température	177
5.4.2.	Prédiction de la contrainte en fonction de la taille de grain	178
5.4.3.	Implication d'autres mécanismes	178
5.5.	Conclusions	180
6.	Conclusion générale	181
6.1.	Méthode et résultats	181
6.1.1.	Modèle de plasticité cristalline	181
6.1.2.	Monocristaux	182
6.1.3.	Polycristaux	184

6.2. Perspectives	186
<i>Annexe A</i>	189
<i>Annexe B</i>	191
<i>Annexe C</i>	195
<i>Annexe D</i>	197
<i>Bibliographie</i>	199

1. Introduction

1.1. Enjeux industriels

Dans une centrale nucléaire avec réacteurs à eau pressurisée (REP), la production d'électricité se fait par les étapes décrites sur la figure 1.1 :

- De la chaleur est produite par la fission du combustible dans le cœur du réacteur,
- L'eau pressurisée à 150 bars passe à travers le cœur pour récupérer cette chaleur et atteint jusqu'à 350°C en partie haute des crayons combustibles (la pression permet de garder l'eau à l'état liquide),
- La chaleur de l'eau qui circule dans le circuit primaire est transmise à l'eau du circuit secondaire à l'aide d'un échangeur thermique,
- Ce dernier génère la vapeur permettant aux turbines de fournir l'énergie mécanique transmise aux alternateurs pour produire de l'électricité,
- La vapeur rencontre ensuite un troisième circuit d'eau froide pour permettre sa condensation et recommencer son cycle,
- L'énergie thermique extraite pour la condensation est ensuite évacuée sous forme de vapeur dans les tours de refroidissement.

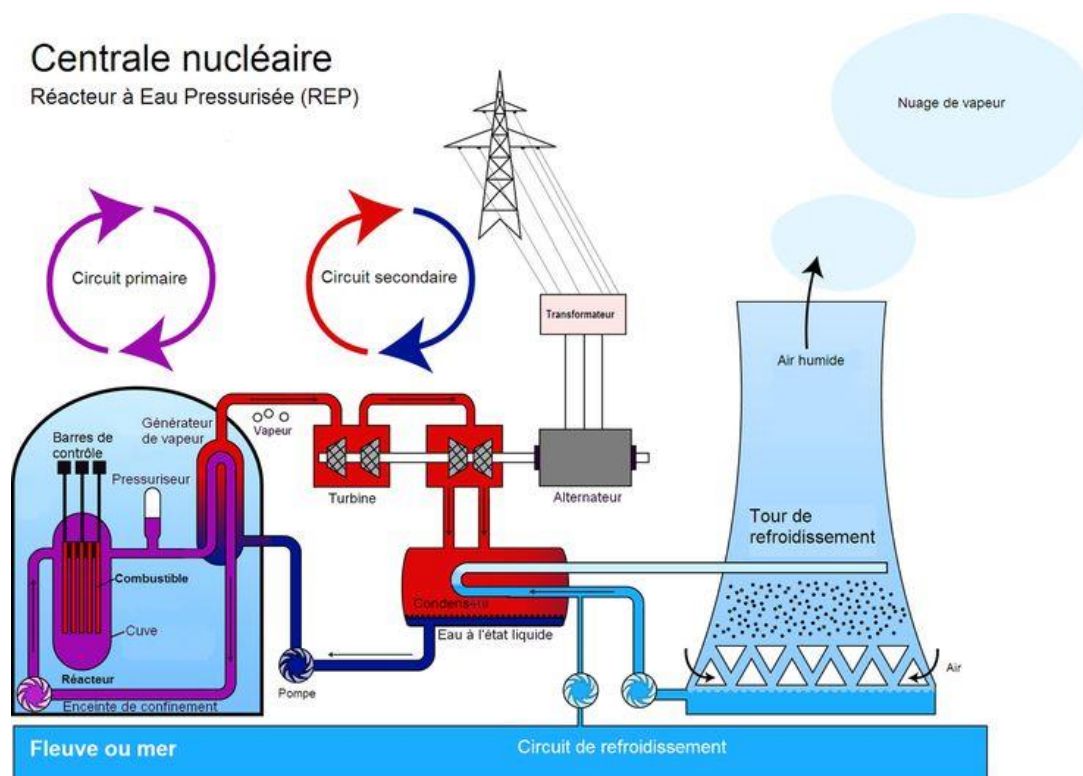


figure 1.1 : Schéma d'une centrale avec un réacteur à eau pressurisée (REP)

Le cœur du réacteur est composé d'assemblages combustibles (voir figure 1.2), comprenant un ensemble de crayons combustibles eux-mêmes composés d'une gaine en alliage de Zirconium et d'un empilement de pastilles combustibles. En France le

combustible des réacteurs EDF est une céramique qui peut être le dioxyde d'uranium UO_2 ou, pour le recyclage du plutonium, un oxyde mixte $(\text{U,Pu})\text{O}_2$ mélange d'uranium et de plutonium.

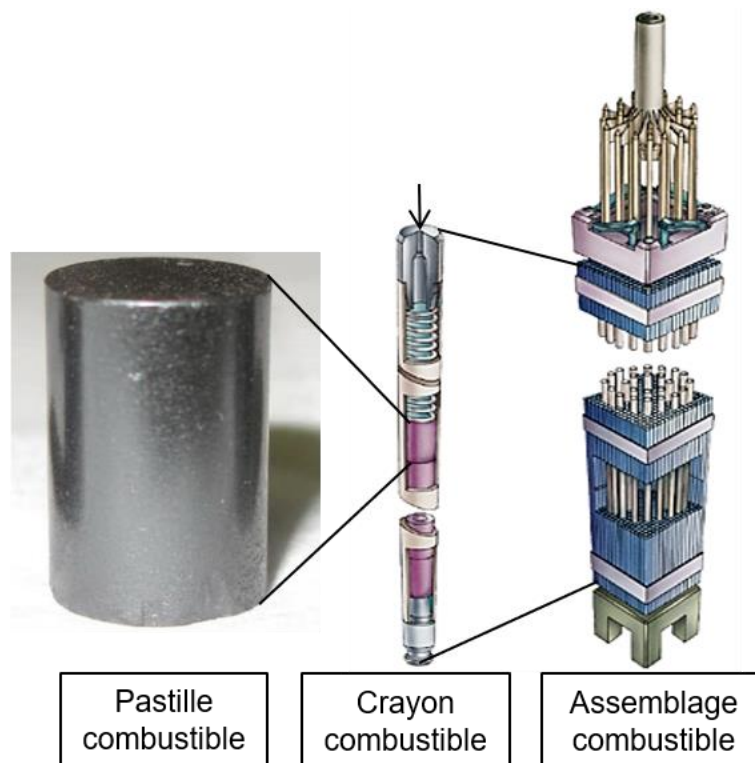


figure 1.2 : Composants du cœur des REP

Un des principaux enjeux de sûreté pour l'exploitation des réacteurs est d'assurer l'intégrité mécanique de la première barrière dans toutes les conditions de fonctionnement : nominal (figure 1.3(a)), incidentel figure 1.3(b), accidentel). En effet, au cours de la réaction de fission la pastille gonfle dû aux dilatations thermiques et aux effets de l'irradiation. Ce gonflement couplé à la réduction diamétrale de la gaine, liée à la pression externe de l'eau, tendent à fermer le jeu initial entre la pastille et la gaine. D'autre part, le gradient thermique radial élevé dans le combustible (120 °C/mm) induit une fissuration des pastilles dès la première montée en puissance et les fragments résultants, soumis aux dilatations différentielles, prennent une forme de diabolos (voir figure 1.4). Après la fermeture du jeu, cette forme en diabolos conduit à une interaction mécanique locale entre la pastille et la gaine. Par la suite, cette interaction pastille-gaine (IPG) peut être accentuée lors d'un transitoire de puissance incidentel avec une forte élévation de la puissance dans un temps de l'ordre de la minute comme illustré sur la figure 1.3(b).

En pratique ces rampes de puissance sont étudiées dans les réacteurs expérimentaux avec des conditions représentatives du réacteur devant adapter sa puissance pour le suivi de réseau (évolution de la demande de production d'électricité). Dans ce cas-là, la température peut monter rapidement engendrant des forts gradients de température

entre le centre et la périphérie de la pastille (voir figure 1.5) menant à un accroissement de l'interaction mécanique entre la pastille et la gaine. Les températures du combustible supérieures à 1000°C permettent le comportement viscoplastique au centre des pastilles. La déformation de la pastille étant plus aisée les contraintes sur la gaine sont relaxées. Cependant, le temps caractéristique de relaxation dépend de la température et de la vitesse de déformation induite par les dilatations différentielles. Typiquement la pastille subit des températures comprises entre 1100°C et 1700°C et des vitesses de déformation comprises entre 10^{-5} et 10^{-3} s^{-1} . La compréhension de ce mécanisme viscoplastique permet alors de contribuer à la sûreté des centrales mais également d'améliorer les performances en proposant de nouvelles conceptions de la pastille qui minimisent les effets d'interaction lors des transitoires de puissance.

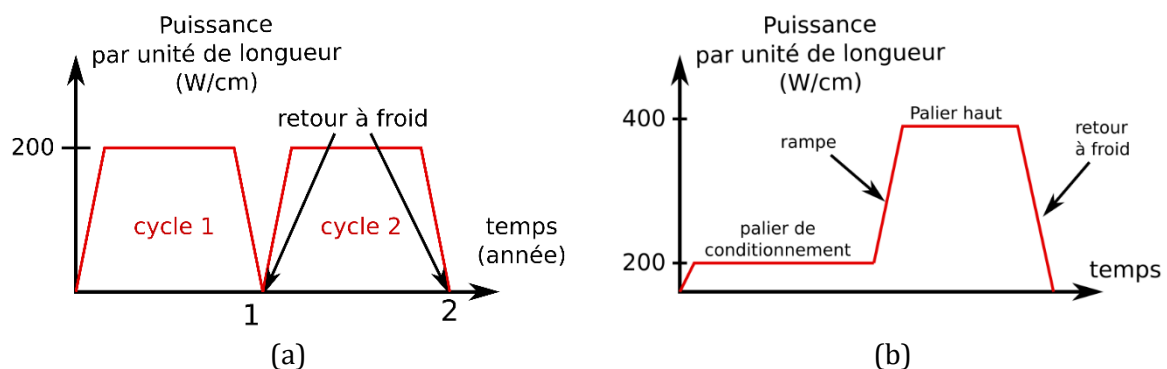


figure 1.3 : Schéma de la puissance des réacteurs en fonction du temps - (a) cycle de fonctionnement nominal d'un réacteur. Annuellement le combustible subit des montées et descentes de puissance appelées transitoires de puissance - (b) essai expérimental d'une rampe de puissance incidentelle

En lien avec les études expérimentales de l'IPG des outils de simulation numérique ont été développés pour contribuer à l'analyse du comportement des combustibles en réacteurs. Le CEA développe depuis de nombreuses années avec ses partenaires industriels la plateforme logicielle PLEIADES [Michel et al. (2013)] pour la simulation du comportement des combustibles en service. Le comportement du combustible en réacteur est régi par un ensemble de phénomènes physico-chimiques (irradiation des matériaux, les gaz de fission, la corrosion de la gaine, *etc...*) qui interagissent fortement avec les comportements thermique et mécanique. Ce comportement multi-physique complexe rend indispensable l'utilisation d'outils de simulation élaborés, notamment du fait des difficultés associées aux expériences sous irradiation et à la caractérisation des matériaux irradiés. Par conséquent, la simulation permet d'approfondir l'analyse et de guider l'expérience. Pour les REP la plateforme PLEIADES propose une application industrielle CYRANO développée par EDF et une application dédiée à la recherche ALCYONE développée par le CEA.

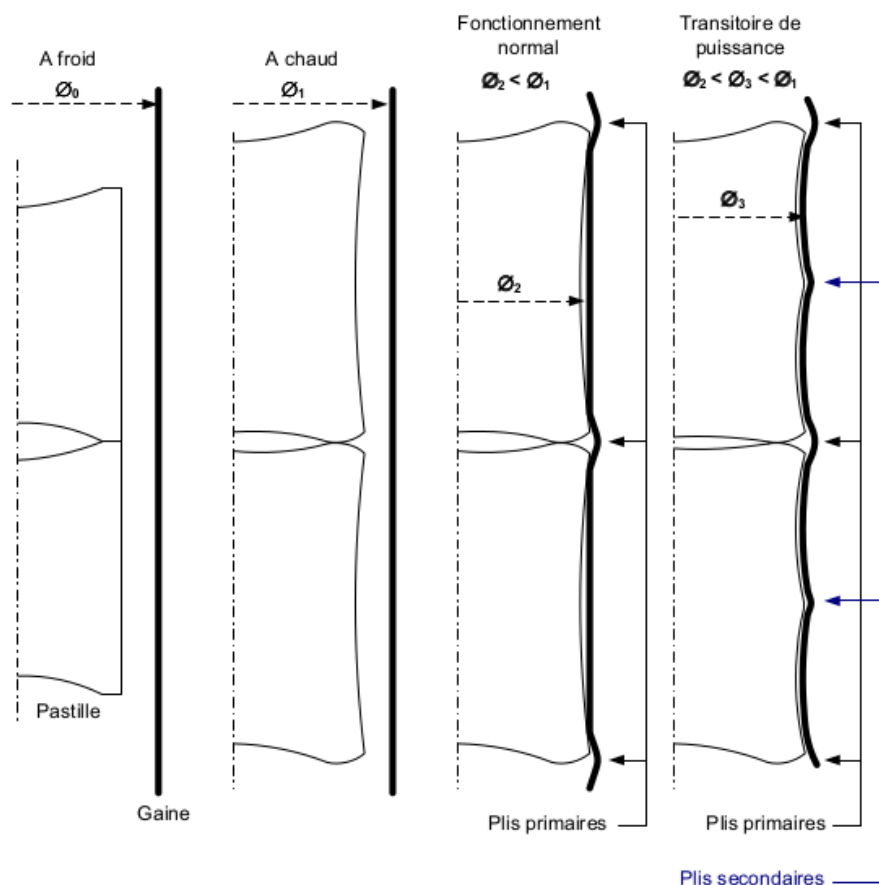


figure 1.4 : Schéma de la mise en diabolisme des pastilles au cours des cycles de puissance du réacteur

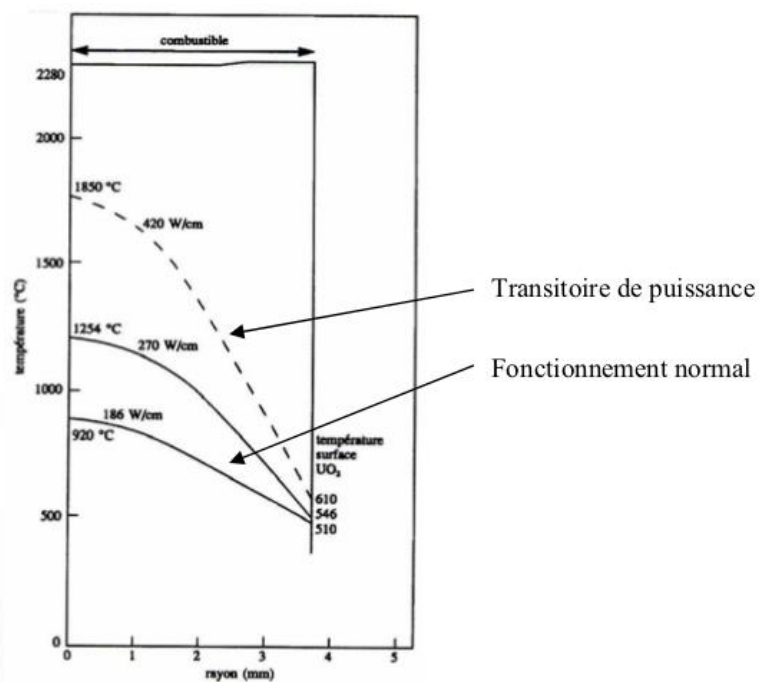


figure 1.5 : Gradient de température subi par la pastille pour différentes puissances [Bouloire (2001)]

Concernant la partie mécanique de ces outils de simulation, les lois de comportement décrivant la viscoplasticité du combustible sous irradiation à l'échelle macroscopique sont basées sur l'équation suivante :

$$\dot{\varepsilon}^{fl} = \dot{\varepsilon}^{irr}(\dot{F}) + \dot{\varepsilon}^{vp}(1 + c\dot{F}) \quad (1.1)$$

avec $\dot{\varepsilon}^{fl}$ la vitesse de déformation de fluage totale, $\dot{\varepsilon}^{irr}$ la vitesse de déformation de fluage induite par l'irradiation et $\dot{\varepsilon}^{vp}$ la vitesse de déformation viscoplastique thermique du matériau avec un effet d'accélération due à l'irradiation (coefficient c), et $\dot{F}$ le taux de fission.

1.2. Objectif de la thèse

Parmi les phénomènes à l'origine des déformations viscoplastiques du combustible sous irradiation nous nous focaliserons dans ces travaux sur ceux liés à des mécanismes thermiquement activés. L'objectif de ce travail est d'analyser plus spécifiquement les mécanismes de glissement des dislocations responsables du comportement viscoplastique sur une partie du domaine ($T \in [1100^\circ\text{C}, 1700^\circ\text{C}]$, $\dot{\varepsilon} \in [10^{-5}; 10^{-3}]$), pour les conditions de sollicitation du combustible lors des transitoires de puissance. L'approche multi-échelle réalisée dans cette étude consiste, dans un premier temps, à modéliser le comportement viscoplastique de l' UO_2 lié aux glissements des dislocations, sur un monocristal à l'aide d'un modèle de plasticité cristalline. Ensuite, ce dernier est utilisé pour chaque grain d'un polycristal afin de simuler le comportement d'un élément de volume d' UO_2 . Les résultats de ces simulations permettront d'améliorer deux outils de simulation de la plateforme PLEIADES :

- Application VER pour la simulation du comportement d'un élément de volume hétérogène,
- Application ALCYONE pour les lois de comportement macroscopique de la pastille utilisées dans le module mécanique.

Ce document est composé de quatre parties avec, en premier, un état de l'art sur le comportement viscoplastique des pastilles et les lois de comportement associées utilisées dans la littérature. Et d'autre part, une revue détaillée est donnée sur le comportement viscoplastique des monocristaux d' UO_2 et des mécanismes d'activation du glissement des dislocations. La deuxième partie traite de la construction d'un modèle de plasticité cristalline de l' UO_2 en se basant sur le comportement viscoplastique des monocristaux. Cela permettra une première analyse des mécanismes de glissement des dislocations. En troisième partie, une étude de dynamique des dislocations est présentée pour déterminer les coefficients de la matrice d'interaction propre à l' UO_2 . Cela permet d'améliorer le modèle pour la simulation de l'effet de la taille de grain dû à l'empilement des dislocations aux joints de grain dans les polycristaux. Finalement, la dernière partie traite de la simulation des polycristaux d' UO_2 permettant la validation du modèle à l'aide de la comparaison avec les essais sur pastilles vierges.

2. État de l'art : viscoplasticité des pastilles combustibles

Dans ce chapitre nous présentons les connaissances actuelles sur le comportement viscoplastique des pastilles combustibles avec dans un premier temps les connaissances macroscopiques, puis dans un second temps, les mécanismes de déformation liés aux glissements des dislocations à l'échelle du grain.

Sommaire

2.1. Deux mécanismes viscoplastiques	18
2.2. Couplage des mécanismes	19
2.3. Dépendance à la taille de grain	23
2.4. Autres paramètres	24
2.4.1. Effet de la stœchiométrie	24
2.4.2. Effet de la porosité	24
2.5. Description du mécanisme de viscoplasticité par glissement des dislocations	25
2.5.1. Rappels sur les dislocations	25
2.5.2. Dislocations dans l' UO_2	32
2.6. Positionnement de la thèse	37

2.1. Deux mécanismes viscoplastiques

La viscoplasticité est un phénomène physique qui engendre une déformation irréversible du matériau. Cela s'explique par le mouvement de défauts à très petite échelle conduisant à une déformation rémanente sans endommagement ou fissuration macroscopique du matériau.

La notion de viscoplasticité implique le temps, c'est-à-dire que pour une contrainte constante la déformation s'accroît au cours du temps traduisant un mouvement des défauts entretenu sous l'effet de la contrainte. Ce type de comportement se caractérise donc par une vitesse de déformation dépendante de la contrainte et inversement.

De manière générale, il existe deux types de mécanismes engendrant la déformation viscoplastique dans un matériau : la diffusion de lacunes et le glissement des dislocations. Ces deux mécanismes peuvent être présents de façon couplée, par exemple dans le cas de la montée des dislocations par diffusion des défauts lacunaires, ou de façon indépendante en conduisant à des déformations qui s'ajoutent. D'un point de vue expérimental, ces mécanismes sont mis en évidence à l'échelle macroscopique par des graphes représentant le logarithme de la vitesse de déformation en fonction du logarithme de la contrainte. Cette représentation « *log-log* », telle qu'elle est représentée en figure 2.1, permet notamment d'identifier différents domaines de contraintes où la sensibilité de la vitesse de déformation $\dot{\epsilon}$ à la contrainte σ est différente. Ces domaines sont alors caractéristiques de chaque mécanisme viscoplastique. Pour une gamme de contrainte donnée, les points expérimentaux peuvent être corrélés par une droite dans le graphe *log-log* d'équation $\log(\dot{\epsilon}) = \log(\dot{\epsilon}_0) + n \times \log(\sigma)$. Cette corrélation traduit une loi de vitesse de déformation en fonction de la contrainte de type puissance :

$$\dot{\epsilon} = \dot{\epsilon}_0 \sigma^n \quad (2.1)$$

avec $\dot{\epsilon}_0$ la vitesse de déformation lorsque le logarithme de la contrainte est nul et n l'exposant de contrainte qui représente la sensibilité de la vitesse de déformation à la contrainte. D'un autre point de vue, ce type de loi peut être interprété par le fait que plus l'exposant n est grand, plus le comportement est plastique, et moins il est grand, plus le comportement est visqueux.

Comme nous l'avons souligné dans l'introduction, la température joue un rôle important. En effet, de manière générale, les mécanismes sont thermiquement activés ce qui signifie que l'équation (2.1) est très souvent modifiée en équation (2.2) en considérant l'énergie d'activation Q représentative de la barrière d'énergie nécessaire pour activer la déformation.

$$\dot{\epsilon} = \dot{\epsilon}_0 \exp\left(-\frac{Q}{k_b T}\right) \sigma^n \quad (2.2)$$

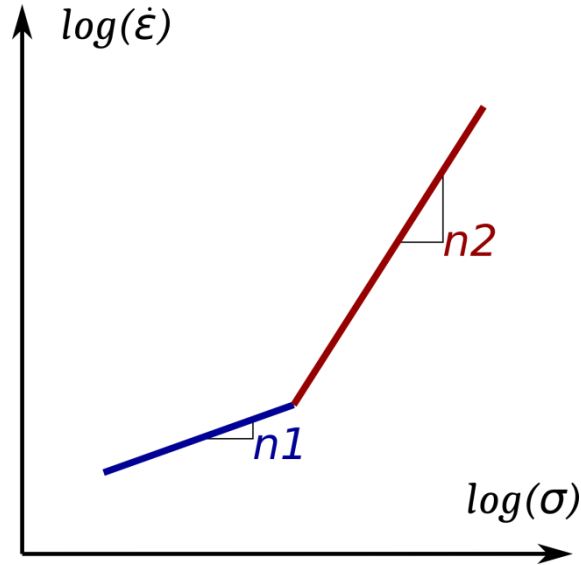


figure 2.1 : Graphe $\log$ - $\log$ de la vitesse de déformation $\dot{\epsilon}$ en fonction de la contrainte σ – Les deux pentes représentent les différences de sensibilité de la vitesse de déformation à la contrainte de deux mécanismes viscoplastiques

L'identification des différents mécanismes par les paramètres n et Q fait l'objet de travaux anciens dans la littérature pour l' UO_2 . [Seltzer et al. \(1970\)](#) proposent une synthèse des données de la littérature [[Poteat et Yust \(1968\)](#), [Wolfe et Kaufman \(1967\)](#), [Bohaboy et al. \(1969\)](#), [Armstrong et al. \(1962\)](#)] et mettent ainsi en évidence deux mécanismes viscoplastiques dans l' UO_2 par un changement d'exposant de la loi puissance (voir figure 2.2). [Bohaboy et al. \(1969\)](#) identifient un premier mécanisme avec un exposant de contrainte de 1 et un deuxième mécanisme dont l'exposant est de 4,5. La loi proposée est :

$$\dot{\epsilon} = A\sigma \exp\left(-\frac{Q_1}{k_b T}\right) + B\sigma^{4,5} \exp\left(-\frac{Q_2}{k_b T}\right) \quad (2.3)$$

À la suite de ces études, cette approche a été largement utilisée notamment dans les travaux de [Guerin \(1975\)](#), [Dherbey et al. \(2002\)](#), [Salvo \(2014\)](#) et [Ben Saada \(2017\)](#).

2.2. Couplage des mécanismes

Dans la réalité, le mouvement des défauts répond à des mécanismes complexes relevant de plusieurs échelles et les paramètres de la loi macroscopique de type puissance doivent être ajustés pour une gamme température-vitesse de déformation spécifique. Ainsi, en regroupant plusieurs résultats, pour une même température, on observe des exposants de contrainte qui évoluent de manière croissante avec la contrainte. C'est pourquoi l'utilisation d'une loi puissance avec un exposant de contrainte constant est parfois remise en cause et peut être remplacée par des formes de loi exponentielle telle que la loi en sinus hyperbolique [[Poirier \(1976\)](#)]. [Soulafrancois](#)

(2014) et Salvo (2014) se sont inspirés des lois en sinus hyperbolique pour décrire le comportement viscoplastique macroscopique de l'UO₂ (équation (2.4)) :

$$\dot{\varepsilon} = \dot{\varepsilon}_0 \exp\left(-\frac{Q'}{k_b T}\right) \sinh\left(\frac{\sigma}{\sigma_0}\right) \quad (2.4)$$

Cette loi étant très efficace pour décrire le comportement macroscopique du polycristal dans des gammes de vitesse et de température très larges, elle reste néanmoins empirique.

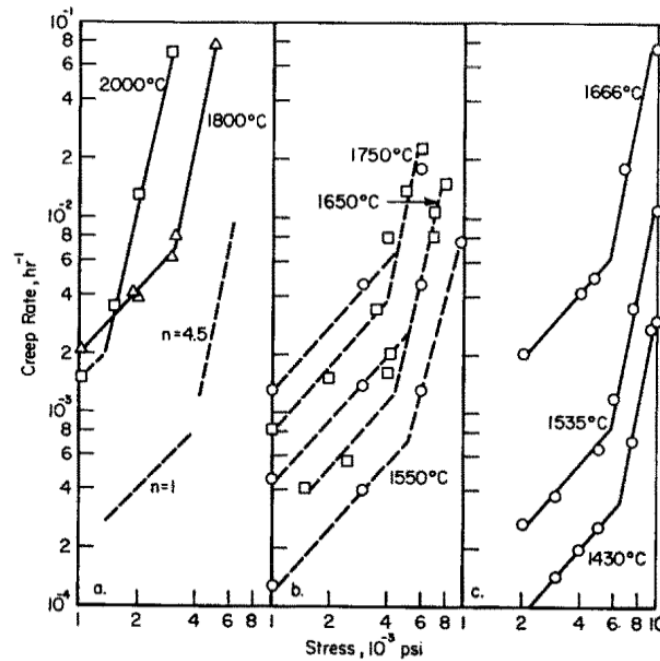


figure 2.2 : Deux régimes viscoplastiques mis en évidence par un changement de dépendance de la vitesse de fluage à la contrainte de Seltzer et al. (1970)

En 1982, Frost et Ashby (1982) proposent des cartographies de vitesse de déformation, contrainte et température de différents matériaux en fonction des mécanismes viscoplastiques impliqués. Pour l'UO₂, ils proposent les cartographies, présentées en figure 2.3, basées sur les travaux expérimentaux de Wolfe et Kaufman (1967), Poteat et Yust (1968), Bohaboy et al. (1969), Seltzer et al. (1971), Rice et Becher (1971), Burton et al. (1973) et Radford et Terwilliger (1975). Ces cartographies réunissent ces données expérimentales de vitesse de déformation en fonction de la contrainte pour différentes températures pour des tailles de grain de 10µm. Tous mécanismes confondus, la figure 2.3(b) montrent bien la dépendance croissante de la vitesse de déformation à la contrainte. Les auteurs définissent alors des zones représentatives de certains mécanismes de viscoplasticité :

- La zone de « Diffusional flow » est représentative du fluage par diffusion de lacunes qui peut se faire dans le réseau cristallin (mécanisme de Nabarro-Herring [Nabarro (1948), Herring (1950)], ou aux joints de grains (mécanisme de Coble (1963)).

- La zone « Power Law Creep » est représentative du glissement simple des dislocations ou assisté par la montée.
- La zone « Plasticity » représente le glissement avec des fortes frictions de réseau.

La méthode utilisée par [Frost et Ashby \(1982\)](#) consiste à définir les lois de comportement de chaque mécanisme cité précédemment et d'identifier au mieux les paramètres associés à partir des données expérimentales. Notons, qu'il peut exister plusieurs lois et mécanismes dans un même groupe. Ensuite, une sélection du mécanisme prépondérant parmi ceux appartenant au même groupe (par exemple « Power low creep ») est faite en sélectionnant celui qui a une vitesse de déformation la plus élevée à contrainte et température données. Enfin, le cisaillement est calculé comme étant la somme de mécanismes sélectionnés dans chaque groupe. Les frontières sont donc données lorsque les vitesses de déformation de deux mécanismes différents sont égales. On comprend bien qu'avec peu de données, il n'est pas possible de définir avec précision les frontières des différents mécanismes et la loi de comportement de chacun d'eux. C'est pourquoi les auteurs préviennent les utilisateurs d'éventuelles erreurs. Cependant, il apparait que les données expérimentales utilisées par les auteurs correspondent bien avec la cartographie qui permet d'extraire des informations importantes.

Il est naturel de s'interroger sur la manière de coupler les différents mécanismes. Une première approche est de considérer que les mécanismes cohabitent sans interaction et peuvent donc s'additionner. C'est par exemple ce qui est proposé par [Bohaby et al. \(1969\)](#) dans l'équation (2.3), dans laquelle on raccorde les deux expressions sans effets d'interaction dans le domaine où la diffusion peut modifier le glissement des dislocations. Une deuxième approche peut être de considérer une fonction de raccordement entre la diffusion et le glissement des dislocations, afin de prendre en compte de manière empirique un ensemble de mécanismes. Ce type d'approche est utilisé dans le code calcul ALCYONE avec la loi [Monerie et Gatt \(2006\)](#). Dans ce cas, deux mécanismes viscoplastiques sont considérés avec un mécanisme de fluage par diffusion intra-granulaire et un mécanisme lié aux dislocations (sans précision du type de mouvement). Au cours de la déformation, la viscoplasticité peut passer d'un mécanisme à l'autre à l'aide d'une fonction de couplage dépendant de la contrainte et de la température. Cette modélisation permet notamment de simuler les pics de compression observés expérimentalement en début d'essai pour certaines conditions de température-vitesse [[Guerin \(1975\)](#), [Lefebvre \(1976\)](#), [Salvo \(2014\)](#)].

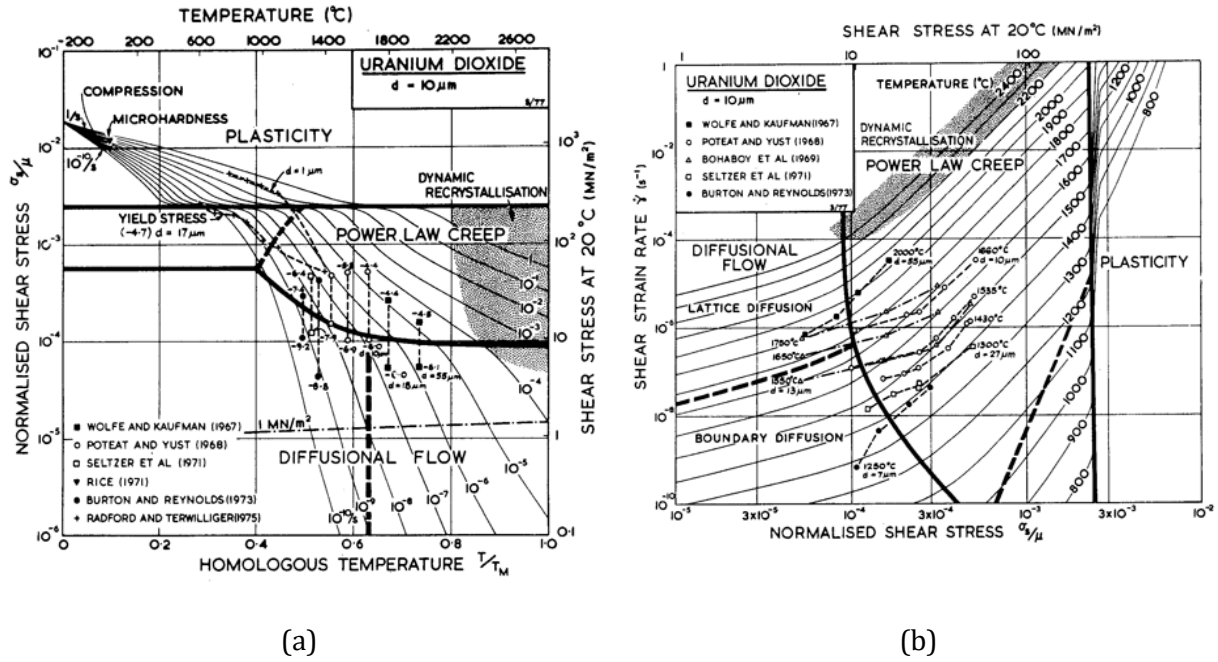


figure 2.3 : Cartographies des mécanismes viscoplastiques pour l' UO_2 [Frost et Ashby (1982)]
 – (a) isovaleurs de vitesse de déformation dans une carte de contrainte en fonction de la température – (b) isovaleurs de la température dans une carte de la vitesse déformation en fonction de la contrainte

Enfin, on peut utiliser un autre point de vu, en considérant une approche thermodynamique prenant en compte l'ensemble des mécanismes avec leur énergie d'activation dans une seule équation. Pour cela, nous introduisons d'abord la loi d'Arrhenius qui décrit la vitesse de changement d'état v en fonction de la barrière d'énergie ΔG qui représente la variation d'énergie libre entre les deux états :

$$v = v_0 \exp\left(-\frac{\Delta G}{k_b T}\right) \quad (2.5)$$

Cette loi traduit le fait que la vitesse de changement d'état est calculée à partir d'une vitesse de référence associée au changement d'état multiplié par la probabilité d'occurrence de ce changement. Ainsi, l'effet de l'énergie apportée par la température ($k_b T$) pour franchir la barrière d'énergie ΔG est pris en compte en modifiant la fréquence de l'événement de changement d'état. D'un point de vu thermomécanique l'équation (2.5) s'écrit :

$$\dot{\epsilon} = \dot{\epsilon}_0 \exp\left(-\frac{\Delta H(\sigma)}{k_b T}\right) \quad (2.6)$$

avec ΔH la barrière d'énergie représentant la variation d'enthalpie en fonction de la contrainte appliquée. D'après le second principe de la thermodynamique, la variation d'enthalpie, pour un mécanisme donné, est égale à la variation d'enthalpie à contrainte nulle ΔH_0 moins le travail des forces plastiques donné par le produit $\sigma \Delta V$:

$$\Delta H(\sigma) = \Delta H_0 - \sigma \Delta V \quad (2.7)$$

La barrière d'énergie à contrainte nulle est généralement appelée énergie d'activation et le volume, sur lequel le travail des forces plastiques est non nul, est appelé volume d'activation. Ces deux paramètres dépendent des mécanismes impliqués.

Ce type d'approche avec des paramètres ΔH_0 et ΔV constants a été utilisée par [Dherbey et al. \(2002\)](#) permettant ainsi de décrire le comportement de l'UO₂ pour de larges gammes de contrainte et de température où deux lois puissances était habituellement nécessaires. Ainsi, au lieu de faire référence à deux mécanismes avec deux lois, une seule loi est utilisée et les paramètres (ΔH_0 , ΔV) identifiés font référence à un mécanisme d'auto diffusion de l'UO₂ dans les sous joints de grains (S-JdG).

Des formulations plus physiques de l'énergie d'activation ΔH en fonction de la contrainte ont pu être proposées dans le cas des mécanismes de glissement des dislocations par double-décrochements que nous présentons plus tard dans la section 0.

2.3. Dépendance à la taille de grain

Il apparait également que la taille de grain modifie le comportement en fluage du matériau [[Wolfe et Kaufman \(1967\)](#), [Bohaboy et al. \(1969\)](#), [Burton et al. \(1973\)](#), [Chung et Davies \(1979\)](#), [Knorr et al. \(1989\)](#), [Dherbey et al. \(2002\)](#)]. De plus, la dépendance est différente suivant le mécanisme présent. En effet, pour le fluage par diffusion, plus la taille de grain est petite, plus la vitesse de fluage est élevée que ce soit de la diffusion intra-granulaire [[Nabarro \(1948\)](#), [Herring \(1950\)](#)] ou aux JdG [Coble \(1963\)](#) (voir illustration des mécanismes en figure 2.4).

À l'inverse, dans le cas de la viscoplasticité par glissement des dislocations, une taille de grain décroissante engendre une vitesse de déformation plus faible. Cette dépendance est classiquement expliquée par un empilement des dislocations aux JdG [[Hall \(1951\)](#) et [Petch \(1953\)](#)]. Ce mécanisme sera défini en plus en détail en section 5.2.3 page 144 mettant en évidence l'importance des interactions entre dislocations dans les grains. En effet, de manière générale, dû à l'incompatibilité des déformations entre grain voisin, les dislocations sont stockées dans les grains plutôt que libérées aux JdG engendrant des interactions et donc du durcissement dans le matériau.

Pour traduire cet effet de la taille de grain, il est de coutume de donner au pré-facteur des lois de comportement une dépendance à la taille de grain pour l'UO₂ [[Bohaboy et al. \(1969\)](#), [Dherbey et al. \(2002\)](#), [Monerie et Gatt \(2006\)](#)]. Ainsi la dépendance à la taille de grain pour le mécanisme Nabarro-Herring est $\dot{\epsilon} \propto \frac{1}{d^2}$, pour le mécanisme de Coble est $\dot{\epsilon} \propto \frac{1}{d^3}$ et pour le mécanisme de Hall-Petch est $\dot{\epsilon} \propto d^2$. Les exposants proposés pour le

fluage diffusion peuvent être justifiés analytiquement à partir de la loi de Fick [Tsitsiris et Gatt (2011)].

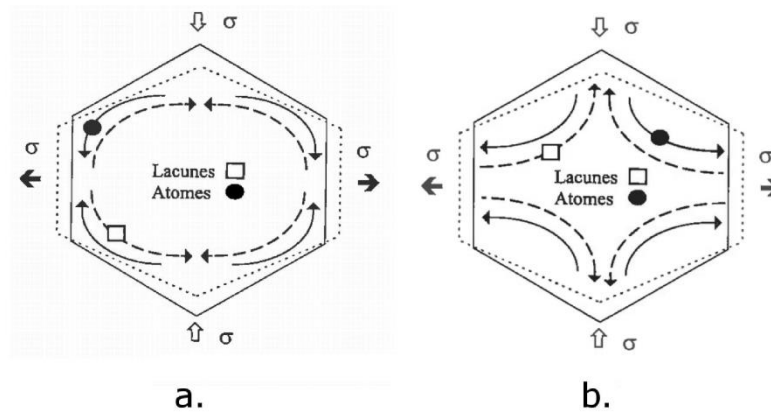


figure 2.4 : Schématisation du mécanisme de diffusion (a) aux joints de grain d'après Coble (1963) et (b) dans le grain d'après Nabarro (1948) et Herring (1950)

2.4. Autres paramètres

2.4.1. Effet de la stœchiométrie

La stœchiométrie est un paramètre qui a beaucoup d'influence sur le comportement mécanique de l' UO_2 en viscoplasticité. Différents auteurs ont étudié le comportement de polycristaux sur-stœchiométrique avec des essais de compression [Byron (1968b), Nadeau (1969), Seltzer et al. (1972)] et avec des essais de fluage en flexion [Scott et al. (1959), Armstrong et Irvine (1963)]. Globalement, il apparaît que plus le rapport O/U est supérieur à 2, plus la contrainte d'écoulement diminue.

2.4.2. Effet de la porosité

Dans un matériau poreux, la surface effective S d'une coupe de ce matériau est égale à la surface totale S_{tot} moins la surface équivalente de pore S_{pores} .

$$S = S_{tot} - S_{pores} \quad (2.8)$$

Ainsi, la contrainte associée à une force F donnée est égale à $\sigma = F/S$. Or plus la porosité est élevée, plus la surface effective est faible et donc plus les contraintes sont fortes. On peut en conclure que la porosité a pour effet d'adoucir le matériau d'un point de vue élastique comme viscoplastique [Bohaboy et al. (1969), Igata et Domoto (1973), Salvo (2014)]. Des effets plus spécifiques de la porosités comme le durcissement par ancrage des dislocations sont proposés pour interpréter des observations expérimentales dans les travaux de Ben Saada (2017). La porosité peut également conduire à des effets de compressibilité dans le domaine des déformations viscoplastiques suivant ce qui est proposé dans la modélisation de Monerie et Gatt (2006).

système de glissement et permet de repérer la direction de cisaillement $\vec{b}$ produit par une dislocation lorsqu'elle glisse suivant son plan d'habitat de normale $\vec{n}$.

Il existe, de manière générale, deux types de dislocation : les dislocations coins et les dislocations vis. En termes de déformations irréversibles la différence entre ces deux types de dislocation est la direction de cisaillement qu'elles produisent lorsqu'elles glissent sachant que le cisaillement se fait toujours dans la direction du vecteur de Burgers $\vec{b}$. Dans le cas de la dislocation coin, le vecteur de Burgers de la dislocation est perpendiculaire à $\vec{l}$ (donc parallèle à $\vec{m}$). Alors, le cisaillement du cristal se fait dans le plan de glissement dans le sens du déplacement de la ligne (voir figure 2.6(a)). Pour une dislocation vis, le vecteur de Burgers est parallèle à $\vec{l}$, alors le cisaillement se fait dans le plan de glissement de manière perpendiculaire au déplacement de la ligne (voir figure 2.6(b)). Notons qu'une dislocation peut être mixte, c'est-à-dire, ni vis ni coin mais entre les deux. On caractérise le degré de mixité par l'angle β entre le vecteur de Burger et le vecteur tangent à la ligne. Pour plus de détails sur ces dislocations et l'arrangement atomique qu'elles impliquent voir par exemple « Theory of Dislocations » [Cottrell (1953)] ou « Théorie des matériaux solides » [Lemaitre et Chaboche (1996)].

En résumé :

- Dislocation de vecteur ligne $\vec{l}$, glissant dans la direction $\vec{m}$ sur un plan de glissement de normale $\vec{n}$ et produisant un cisaillement dans la direction du vecteur de Burgers $\vec{b}$
- Système de glissement $[\vec{b}](\vec{n})$
- Dislocation vis : $\vec{b} \parallel \vec{l}$ ($\beta = 0$)
- Dislocation coin : $\vec{b} \perp \vec{l}$ ($\beta = 90^\circ$)
- Dislocation mixte : $\beta \in]0;90[$
- β est l'angle entre $\vec{b}$ et $\vec{l}$.

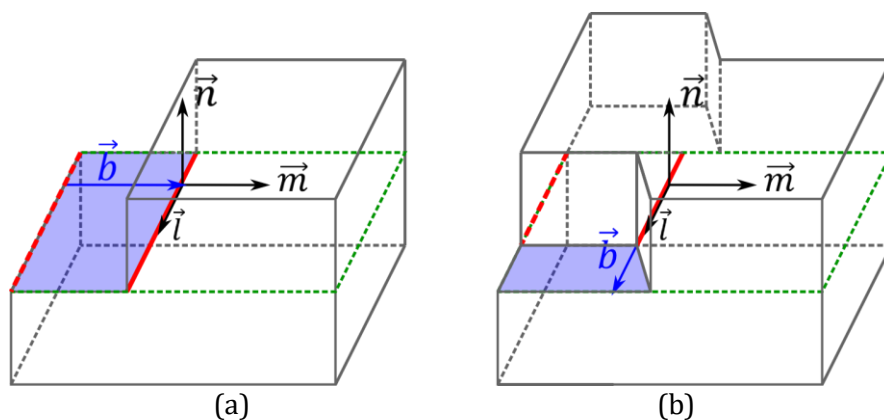


figure 2.6 : Schémas du cisaillement provoqué par une dislocation (a) coin – (b) vis. En bleu la surface de cisaillement du cristal lors du glissement de la dislocation

2.5.1.2. Mouvement des dislocations

Mouvement thermiquement activé :

Dans le réseau cristallin, le potentiel d'énergie (ou potentiel de Peierls) d'une dislocation est choisi sinusoïdal en première approximation dans les approches théoriques simples. La dislocation rencontre des vallées qu'elle doit franchir pour avancer et une barrière d'énergie est associée à ce franchissement comme illustré en figure 2.7. Ainsi, la dislocation se situe à l'état d'équilibre dans une vallée d'énergie (ou vallée de Peierls) et le déclenchement de son glissement dépend de la façon de vaincre la barrière d'énergie pour passer dans une autre vallée. L'énergie nécessaire au glissement est apportée par la contrainte et la température. C'est typiquement ce que traduit la loi d'Arrhenius (voir équation (2.5)). En considérant que la variation d'entropie ΔS est prise en compte dans les modèles mécaniques par la variation des constantes élastiques en fonction de la température [Poirier (1976), Amodeo (2011)], cette équation devient :

$$v = v_0 \exp\left(-\frac{\Delta H(\tau)}{k_b T}\right) \quad (2.9)$$

La barrière d'énergie ΔH se calcule à l'aide l'équation (2.10) où τ représente la contrainte de cisaillement appliquée à la dislocation, τ_p la contrainte de Peierls, c'est-à-dire la contrainte de cisaillement pour activer le glissement à 0 K, et p et q sont des constantes permettant d'ajuster la fonction $\Delta H(\tau)$. Ces paramètres sont généralement bornés entre 0,5 et 1 pour p et entre 1 et 2 pour q [Kocks et al. (1975), Frost et Ashby (1982)].

$$\Delta H(\tau) = \Delta H_0 \left(1 - \left(\frac{\tau}{\tau_p}\right)^p\right)^q \quad (2.10)$$

Ainsi, la barrière d'énergie ΔH est diminuée avec τ , ce qui caractérise un apport d'énergie par la contrainte et le reste de l'énergie est apporté par la température ($k_b T$) avec une probabilité de franchissement de la barrière donnée par la loi d'Arrhenius.

Tant que la contrainte est inférieure à la contrainte de Peierls le mouvement de la dislocation est thermiquement activé, et dépend donc du temps du fait de la fréquence de saut de la barrière. En réalité, seule une portion de la ligne franchi la barrière, faisant apparaître des décrochements reliant les portions de part et d'autre de la barrière comme illustré sur la figure 2.8. Pour que toute la ligne puisse basculer dans la vallée suivante, il faut que la longueur de la portion déjà passée atteigne une longueur critique l_c . L'énergie associée à la formation d'un double-décrochements de longueur l_c est appelée enthalpie de nucléation. Ensuite les décrochements peuvent se propager pour faire basculer toute la ligne. L'énergie associée à la migration des décrochements est souvent considérée comme étant négligeable. En effet, le glissement par double-

décrochements est généralement utilisé dans des matériaux où un caractère de dislocation (vis ou coin) a une barrière de migration négligeable devant l'autre.

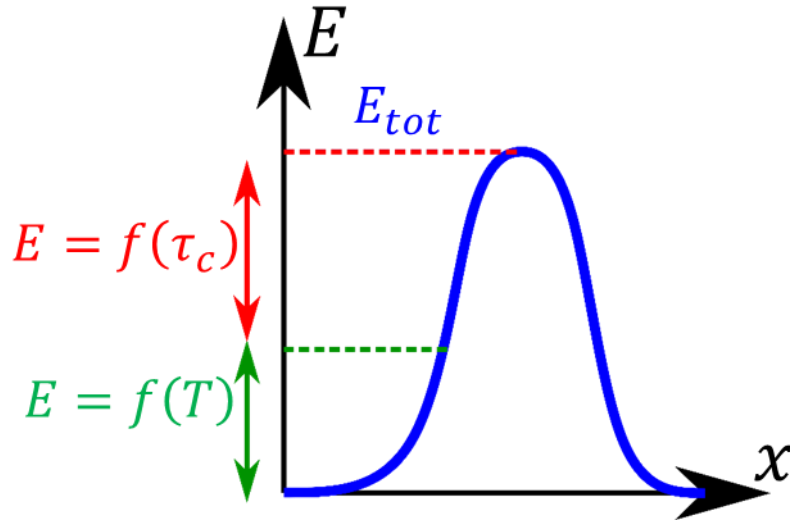


figure 2.7 : Potentiel d'énergie sinusoïdal que voit une dislocation dans le sens de déplacement $\vec{m}$ (x représente la position de la dislocation)

On conviendra également que ce mouvement est fortement anisotrope dans le plan de glissement c'est-à-dire que la ligne se propage que dans un sens privilégié. Dans les matériaux Cubiques Centrés (CC), ce type de mécanisme est rencontré à basse température [Ikeno et Furubayashi (1975), Louchet et al. (1979), Naamane (2008)] ou dans l'olivine [Amodeo (2011)] où la dislocation vis est moins mobile que la dislocation coin donnant de longues lignes orientées dans la direction vis comme illustré en figure 2.9 et des décrochements de caractère coin. Dans l' UO_2 [Soulié et al. (2018)] ont mis en évidence par simulation atomistique des contraintes de Peierls sensiblement plus fortes pour les dislocations coins des systèmes $\{100\}$, et propose l'identification des énergies de nucléation et de migration d'un double-décrochements vis.

On décrit ainsi dans les lois de comportement d'un mécanisme à double-décrochements la vitesse du caractère le moins mobile à l'aide de l'équation (2.11) [Guyot et Dorn (1967), Kocks et al. (1975), Amodeo (2011)].

$$v = a' \frac{\nu_D b}{l_c(\tau)} \frac{L}{2l_c(\tau)} \exp\left(-\frac{\Delta H(\tau)}{k_b T}\right) \quad (2.11)$$

Dans cette équation, ν_D est la fréquence de Debye, L est la longueur moyenne des dislocations et a' est la distance entre deux vallées de Peierls. Notons que le premier terme représente la vitesse moyenne des dislocations lorsque l'énergie d'activation thermique est nettement supérieure à la barrière d'énergie ΔH calculée à l'aide de l'équation (2.10) donnée précédemment.

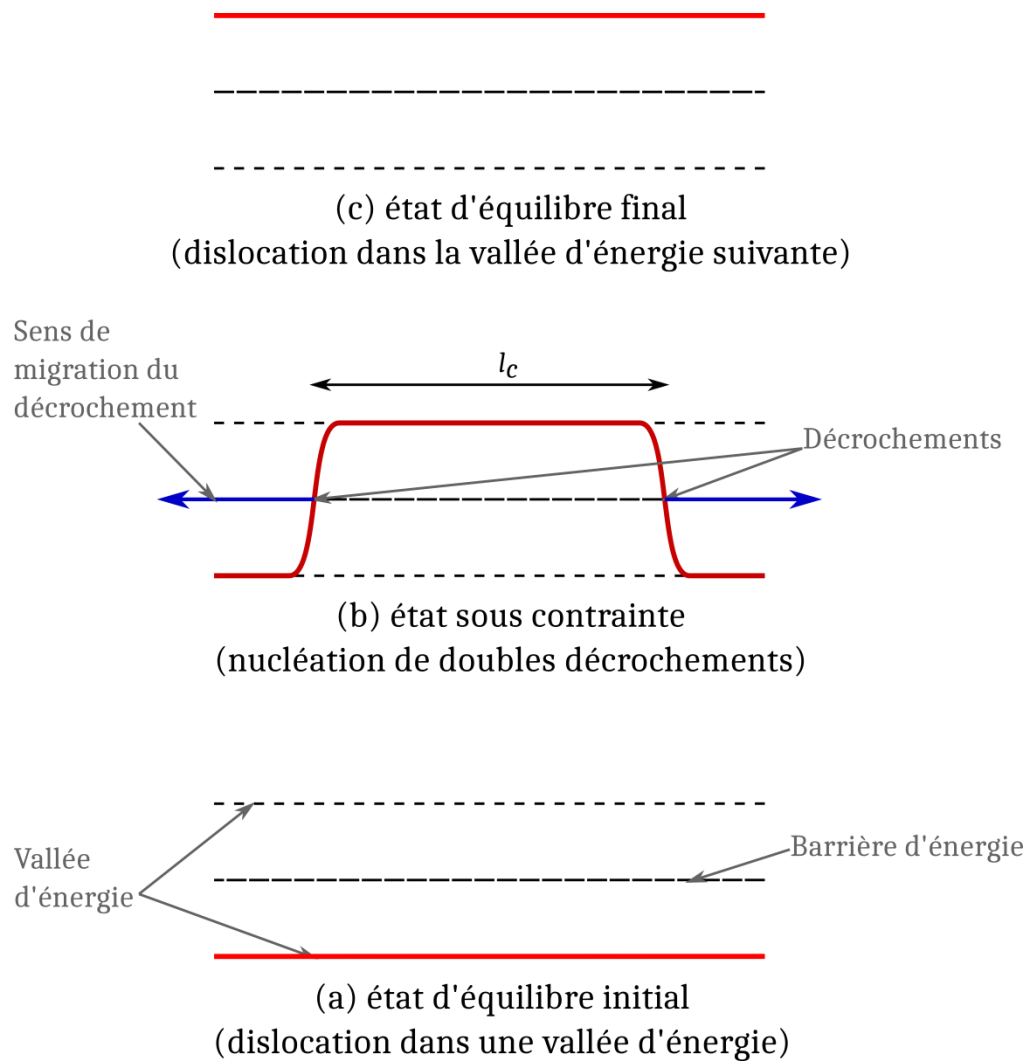


figure 2.8 : Schéma d'un mouvement de dislocation (en rouge) par double-décrochements

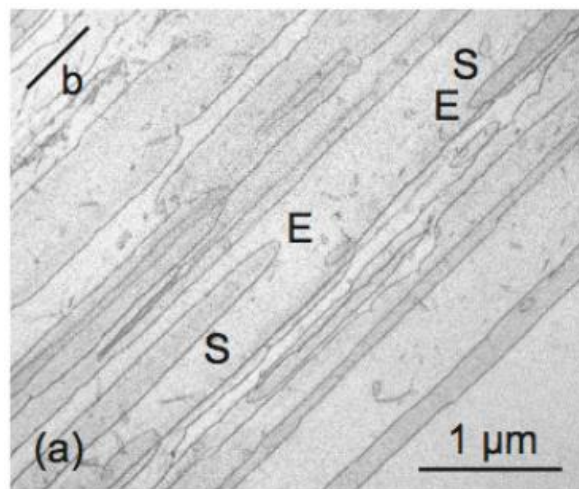


figure 2.9 : Image montrant des dislocations alignées dans la direction vis dans le MgO
[Messerschmidt (2010)]

Notons qu'avant déformation, les dislocations sont aléatoirement réparties dans le matériau avec différents caractères possibles. Ainsi, au début de la déformation les dislocations les plus mobiles, s'activant à contrainte plus faible, glissent jusqu'à disparaître en surface ou à s'immobiliser dans la microstructure. Ce stade de déformation est appelé stade 0 [Brown et Ekvall (1962), Mitchell et al. (1963), Naamane (2008)].

Mouvement athermique :

À partir d'une certaine température, l'apport d'énergie par la température est toujours supérieur à la barrière d'énergie à contrainte nulle. On est donc dans un domaine athermique où la vitesse de glissement des dislocations ne dépend plus de la température. L'application d'une contrainte de cisaillement donne le sens de glissement de la dislocation dans son plan avec une vitesse instantanée contrôlée principalement par l'interaction avec les phonons qui induisent un trainage de type visqueux. La loi de vitesse utilisée pour une dislocation dans ce domaine est la suivante :

$$v = \frac{\tau b}{B} \quad (2.12)$$

où B représente le coefficient de viscosité du matériau en Pa.s.

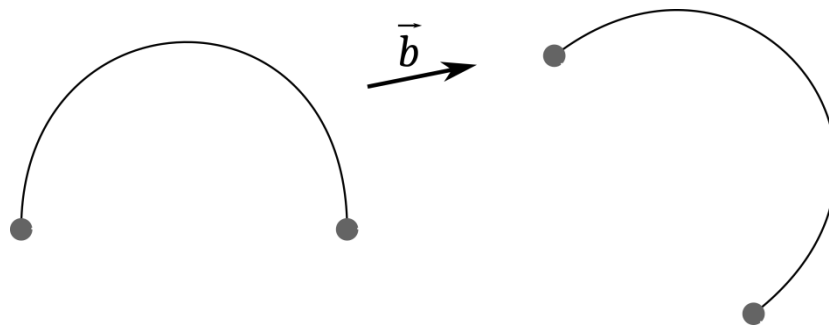


figure 2.10 : Schéma d'une dislocation ancrée dont le mouvement est isotrope dans le plan de glissement. En effet, le déplacement des dislocations est le même quel que soit le caractère de la dislocation (indiqué par le vecteur de Burgers)

Dans ce régime athermique les interactions de la dislocation avec des obstacles (dislocations fixes ou défauts) vont contrôler la vitesse moyenne du mouvement, les temps de vol étant donnés par l'équation précédente et les temps d'attente étant fonction de l'obstacle et de l'état de contrainte. Dans ce cas-là, le mouvement des dislocations en l'absence d'obstacle entre deux points d'accrochage est assez isotrope dans le plan de glissement. C'est-à-dire que son mouvement est le même quel que soit le caractère de la dislocation comme illustré sur la figure 2.10. La réalité est un peu plus complexe que cela et sera discuté dans le chapitre 4. Ce mouvement isotrope favorise la probabilité de réactions entre dislocations comparativement au cas avec mouvement anisotrope par double-décrochements pour lequel la probabilité que deux dislocations se rencontrent est en partie limitée car fonctions des orientations des dislocations ayant

un caractère peu mobile qui sont produites par le mouvement des autres. Nous discuterons plus en détail de ces mécanismes de réaction dans le chapitre 4, en identifiant les forces de réaction de la matrice d'interaction.

Autres mécanismes thermiquement activés :

Notons qu'il existe d'autres mécanismes qui impliquent le glissement des dislocations et qui dépendent de la température. Par exemple le glissement dévié ou la montée de dislocations. Le premier mécanisme se traduit par une déviation des dislocations vis engendrant un changement de plan de glissement de ces dislocations (illustration en figure 2.11). L'activation thermique de ce mécanisme est similaire à celle liée au glissement par double-décrochements avec la température contribuant à franchir la barrière d'énergie nécessaire pour changer de plan de glissement et l'état de contrainte (σ minima dans les deux plans) qui joue aussi sur la hauteur de cette barrière s'opposant à la déviation.

Le second mécanisme implique les dislocations coins qui capturent des interstitiels ou des défauts lacunaires faisant monter la dislocation perpendiculairement à son plan de glissement (illustration en figure 2.12). La vitesse de montée est contrôlée par la diffusion des lacunes et est donc thermiquement activée. La montée peut interagir avec le glissement dans le régime athermique en aidant les dislocations à se désancrer des obstacles. Ce mécanisme de déformation, appelé glissement assisté par la montée, a été proposé initialement pour les métaux et est étendu aux céramiques dans la référence [Philibert (1984)] pour expliquer la forte corrélation entre le comportement en fluage à haute température et la propriété d'autodiffusion. L'autodiffusion peut contrôler le glissement des dislocations à partir de 0,5 fois la température de fusion, cependant ceci semble faire l'objet de discussion notamment dans les références [Poirier (1978), Sherby et Weertman (1979), Poirier (1979)].

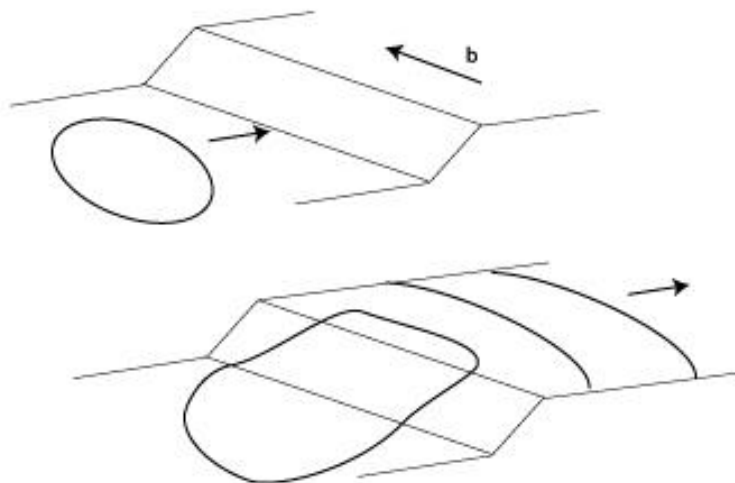


figure 2.11 : Schéma du glissement dévié d'une dislocation vis

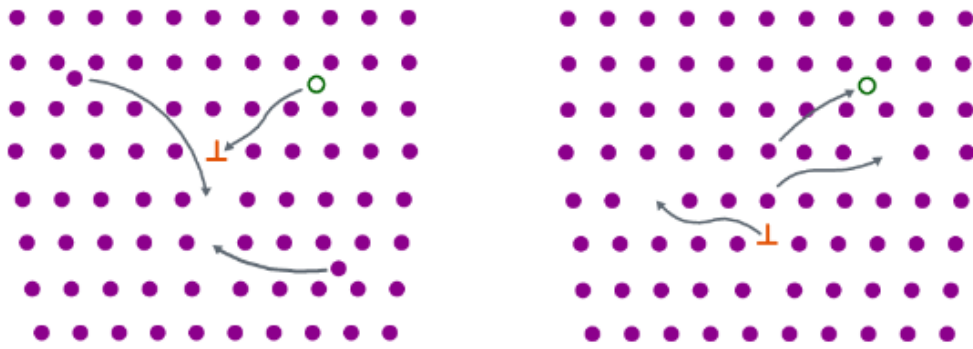


figure 2.12 : Schéma de la montée d'une dislocation coin

2.5.2. Dislocations dans l' UO_2

Le dioxyde d'uranium a une structure cristallographique de type fluorite ce qui veut dire que les atomes d'uranium forment une structure Cubique Face Centrée (CFC) et les atomes d'oxygènes sont positionnés dans les interstitiels tétraédriques formant un réseau cubique (voir figure 2.13).

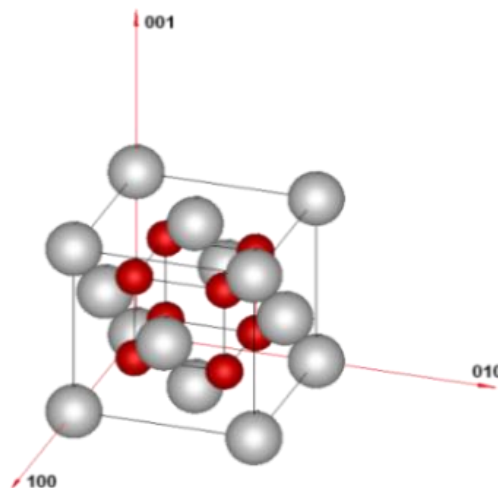


figure 2.13 : Structure fluorite de l' UO_2 . Atomes d'uranium en gris formant un réseau CFC et atomes d'oxygènes en rouge formant un réseau cubique simple

Dans le dioxyde d'uranium, il existe trois types de systèmes de glissement et toutes les dislocations pouvant glisser ont un vecteur de Burgers de type $a_0/2\langle 110 \rangle$, avec a_0 le paramètre de maille égale à $5.47\text{\AA}$ (angström – égale à 10^{-10}m) [Grønvold (1955), Swanson (1953), Soulié et al. (2018)]. D'après la littérature, les trois types de systèmes sont $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle\{100\}$, $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle\{110\}$ et $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle\{111\}$ [Rapperport et Huntress (1960), Byron (1968a), Nadeau (1969), Yust et McHargue (1969), Sawbridge et Sykes (1971), Seltzer et al. (1972), Lefebvre (1976), Alamo et al. (1978), Keller et al. (1988a), Keller et al. (1988b)], aussi appelé respectivement mode $\{100\}$, mode $\{110\}$ et mode $\{111\}$ (voir l'illustration de ces plans sur la figure 2.14). Il existe en tout 24 systèmes de glissement que nous avons classés dans le tableau 2.1. Le classement de ces systèmes est défini

suivant l'ordre des vecteurs de Burgers donnés par Schmid et Boas (1935) dans les CFC. Notons toutefois que les systèmes du mode {111} ne sont pas ordonnés comme dans les CFC. Ces derniers ont été observés dans des matériaux de structure fluorite comme le CaF_2 [Philips (1961), Burn et Murray (1962), Evans et Pratt (1969), Keig et Coble (1968)] ou le BaF_2 [Liu et Li (1964)] ou encore le ThO_2 [Gilbert (1965), Edington et Klein (1966)].

Dans l' UO_2 , la contrainte de cisaillement critique (CRSS pour Critical Resolved Shear Stress) pour les modes {100} et {110} montre une forte dépendance à la température ce qui souligne un comportement thermiquement activé des dislocations. Les valeurs de CRSS plus faibles pour les systèmes $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle\{100\}$ montrent une activation plus facile que pour les systèmes $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle\{110\}$ [Rapperport et Huntress (1960), Nadeau (1969), Sawbridge et Sykes (1971), Lefebvre (1976), Alamo et al. (1978)]. Les températures de transition entre les régimes thermiquement activé et athermique ne sont pas clairement définies et seront discutées dans le chapitre 3. Notons que pour les trois modes des traces de glissement ont été observées en surface des échantillons lors de tests de compression sur monocristaux permettant l'identification des systèmes actifs en fonction de l'orientation. Il a de plus été observé pour certaines orientations que les deux premiers modes peuvent glisser seuls sans la contribution des autres modes comme on peut les voir sur la figure 2.15.

Concernant les systèmes $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle\{111\}$, du glissement est également observé mais toujours en présence des deux autres modes au-dessus de 1000°C [Sawbridge et Sykes (1971), Lefebvre (1976), Alamo et al. (1978), Keller et al. (1988b)] et très souvent sous forme de glissement combiné en suivant le plan de cisaillement maximum (MRSSP pour Maximum Resolved Shear Stress Plane) comme illustré en figure 2.16 mettant en évidence un mécanisme de glissement dévié. Ces systèmes ont également été observés dans le ThO_2 [Gilbert (1965)]. Finalement, du fait que les systèmes appartenant au mode {111} ne sont pas observés seuls, il n'est pas possible de mesurer directement leur CRSS expérimentalement.

Peu de microscopie électronique en transmission (MET) est disponible dans la littérature pour étudier le comportement des dislocations dans l' UO_2 [Yust et McHargue (1969), Seltzer et al. (1972), Lefebvre (1976), Alamo et al. (1978)]. Yust et McHargue (1969) ont caractérisé les microstructures de dislocations du mode {100} pour des températures entre 1050 K et 1700 K (c'est-à-dire dans le domaine thermiquement activé). À faible déformation, ils observent beaucoup de dipôles et de longues dislocations au caractère mixte en forme de *zig-zag*. Ces dislocations droites deviennent enchevêtrées à plus forte déformation. De telles observations ont été confirmées par d'autres études sur {100} et {110} [Seltzer et al. (1972), Alamo et al. (1978)].

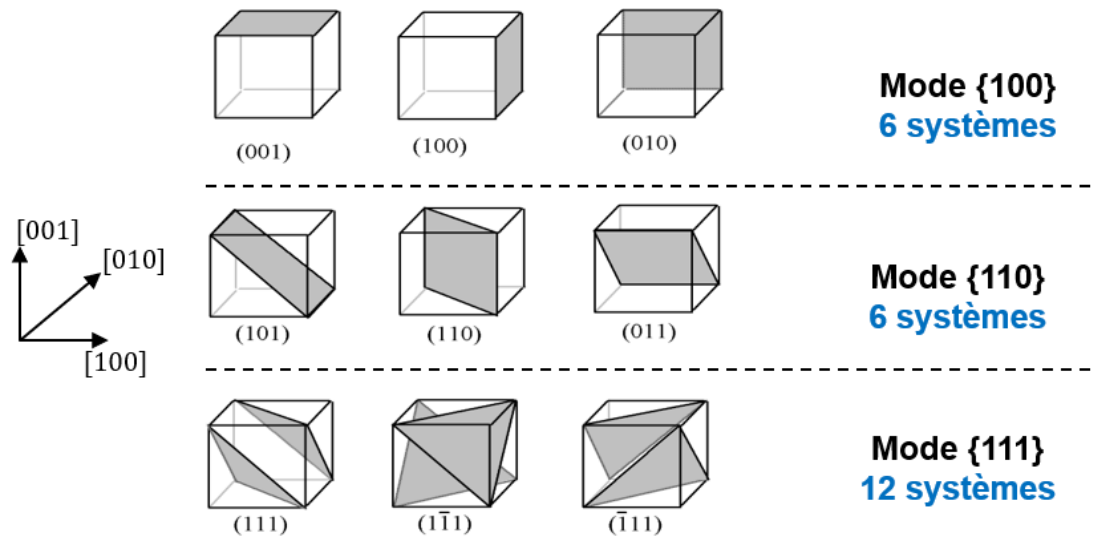


figure 2.14 : Les différents plans de glissement des dislocations dans l'UO₂

tableau 2.1 : Liste des systèmes de glissement de l'UO₂. Notons que lorsqu'on se réfère à un ensemble de système appartenant à un même mode glissement on note l'ensemble avec la convention suivante : $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{\vec{n}\}$. Par contre lorsque l'on fait référence à un système particulier, on utilise la convention suivante : $[\vec{b}](\vec{n})$

Numéro du système	Normale au plan de glissement	Vecteur de Burgers	Numéro du système	Normale au plan de glissement	Vecteur de Burgers
1	(100)	[011]	13	(111-bar)	[011]
2	(100)	[011-bar]	14	(111-bar)	[011]
3	(010)	[101]	15	(111-bar)	[011-bar]
4	(010)	[101-bar]	16	(111)	[011-bar]
5	(001)	[110]	17	(111-bar)	[101]
6	(001)	[110]	18	(111-bar)	[101]
7	(011-bar)	[011]	19	(111)	[101-bar]
8	(011)	[011-bar]	20	(111-bar)	[101-bar]
9	(101-bar)	[101]	21	(111)	[110]
10	(101)	[101-bar]	22	(111-bar)	[110]
11	(110)	[110]	23	(111-bar)	[110]
12	(110)	[110]	24	(111-bar)	[110]

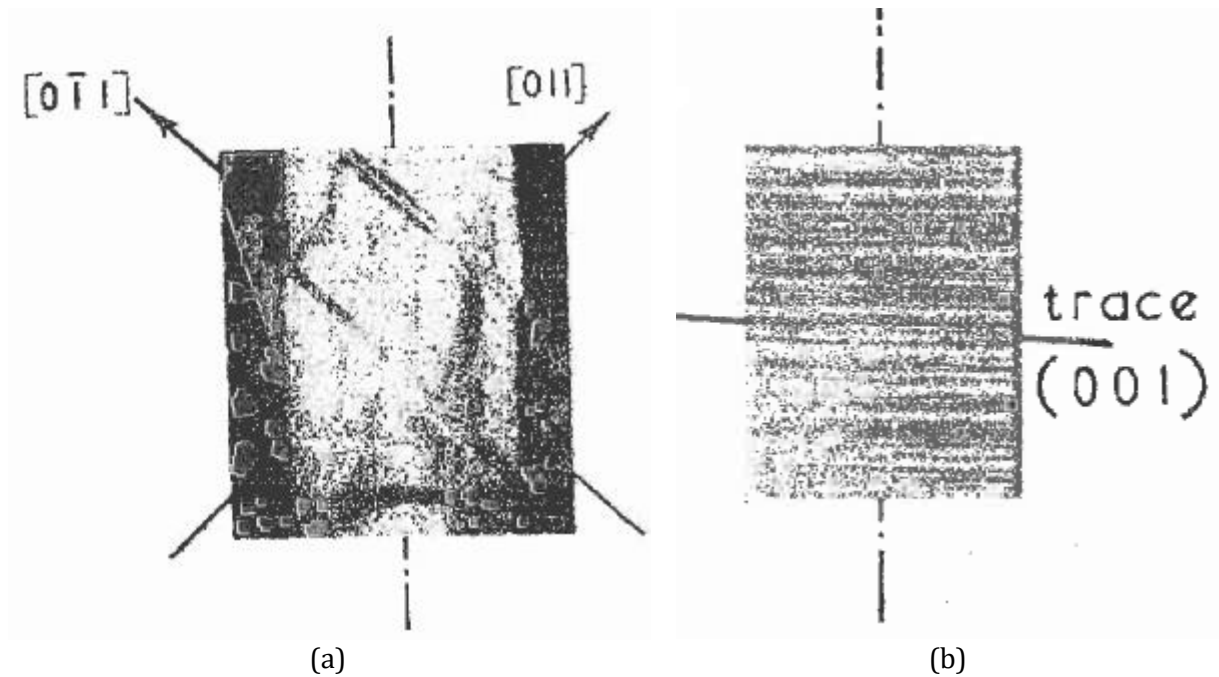


figure 2.15 : Observation des traces de glissement en surface d'échantillon [Sawbridge et Sykes (1971)] – (a) observation du mode $\{110\}$ seul – (b) observation du mode $\{100\}$ seul

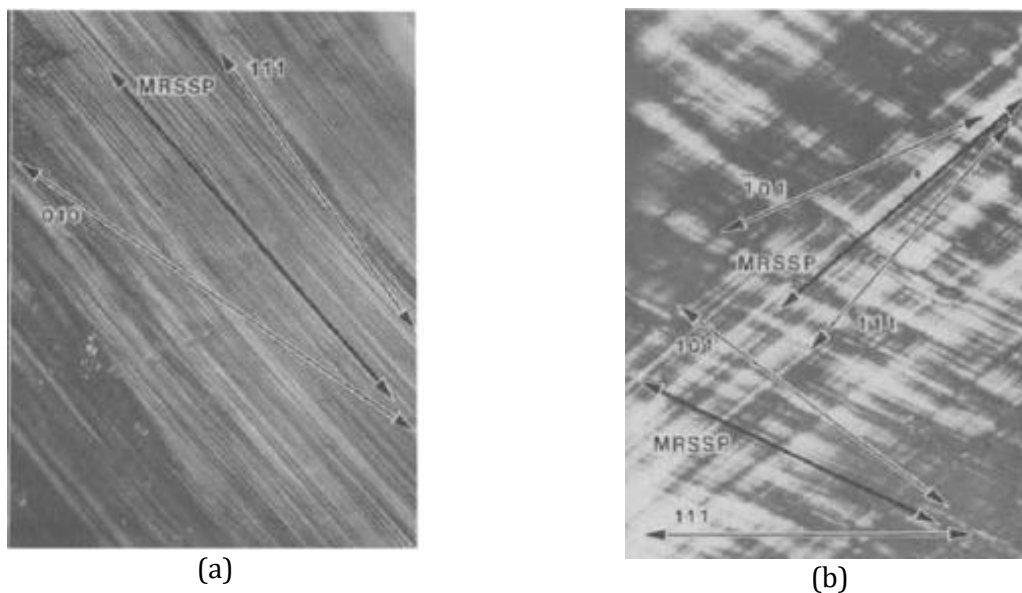


figure 2.16 : Observation du glissement combiné suivant le plan de cisaillement maximum (MRRSP) impliquant le mode $\{111\}$ [Keller et al. (1988b)] – (a) avec le mode $\{100\}$ – (b) avec le mode $\{110\}$

Concernant le mouvement des dislocations, rien ne permet d'affirmer s'il s'agit d'un glissement par double-décrochements. Seuls [Nadeau \(1969\)](#) émet l'hypothèse que ce dernier est présent. De plus, il apparait pour les matériaux fluorites une mobilité surprenante des dislocations coins plus faible que les vis dans les plans $\{100\}$ [[Evans et Pratt \(1969\)](#), [Keig et Coble \(1968\)](#), [Liu et Li \(1964\)](#)]. Cette mobilité est surprenante car ce sont, généralement, les dislocations vis qui sont les moins mobiles dans les autres matériaux. Sawbridge et Sykes [[Sawbridge et Sykes \(1971\)](#), [Sawbridge et Sykes \(1970\)](#)] expliquent cette observation par des cœurs de dislocations coins chargés dans les plans $\{100\}$. Dans les autres plans, les cœurs des dislocations n'étant pas chargés, il n'y a aucune raison que ce soit différent des matériaux CC. Cependant, aucune preuve ne permet d'affirmer ces hypothèses dans l' UO_2 . [Keller et al. \(1988a\)](#) observent au MET des dislocations alignées dans la direction vis dans les plans $\{111\}$ où le glissement est prépondérant à très faible température ($<700^\circ\text{C}$) montrant un probable glissement par double-décrochements (voir figure 2.17). Parmi les autres mécanismes de mouvement des dislocations observés dans la littérature, nous avons évoqué précédemment le glissement combiné qui met en évidence un probable glissement dévié. Il est fort possible que ce mécanisme couplé aux double-décrochements soit responsable des dislocations en forme de *zig-zag*.

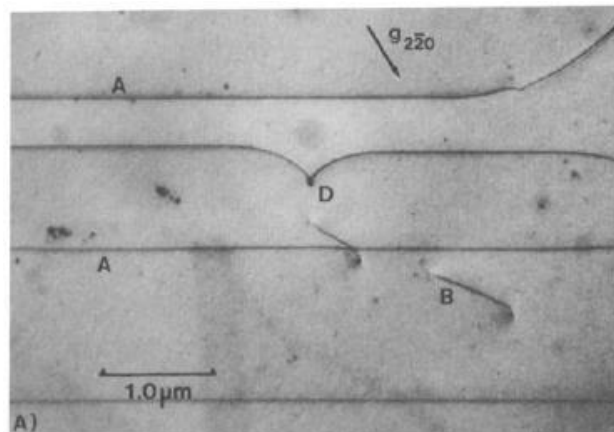


figure 2.17 : Dislocations alignées suivant la direction vis dans un plan de type $\{111\}$ à 873K

Les simulations atomistiques, utilisant des potentiels interatomiques semi-empiriques, ont été réalisées afin de caractériser les barrières de Peierls, les contraintes de Peierls à 0 K et les CRSS en fonction de la température avec de très forte vitesse déformation typiques de la dynamique moléculaire [[Parfitt et al. \(2010\)](#), [Fossati \(2012\)](#), [Skelton et Walker \(2017\)](#), [Soulié et al. \(2018\)](#)]. Les résultats de simulation montrent comme l'expérience que les systèmes $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{100\}$ sont les plus mous et que les systèmes $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{110\}$ les plus durs. Ils montrent également que les systèmes $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{111\}$ ont une activation intermédiaire. Ce dernier résultat ne peut pas être complètement confirmé avec l'expérience où les systèmes $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{111\}$ ne sont jamais observés seuls. De plus [Sawbridge et Sykes \(1971\)](#) montrent qu'en se basant sur une loi de Schmid, l'activation intermédiaire de $\{111\}$ améliore l'interprétation des CRSS pour

certaines orientations mais tend à faire disparaître le mode $\{110\}$ dans des configurations où il est observé de façon concomitante au mode $\{111\}$. Ces derniers points seront discutés plus en détail dans le chapitre 3. D'après [Skelton et Walker \(2017\)](#), la plupart des potentiels empiriques montrent que la dislocation coin dans $\{100\}$ à la plus petite contrainte de Peierls. Ceci est en contradiction avec les résultats de [Lunev et al. \(2017\)](#) et de [Soulié et al. \(2018\)](#) qui montrent que la dislocation coin dans $\{100\}$ est moins mobile et bouge par double-décrochements.

Finalement, il est nécessaire de parler de l'effet de la stœchiométrie sur le glissement des dislocations. Dans les cas sur-stœchiométriques, plus le rapport O/U est élevé, plus le glissement est facile. [Keller et al. \(1988b\)](#) montrent que l'augmentation de la stœchiométrie influence peu le glissement des dislocations sur $\{100\}$ mais beaucoup sur $\{110\}$ et encore plus sur $\{111\}$ qui peut devenir dominant. Les analyses et résultats de [Nadeau \(1969\)](#) sont en accord avec ces résultats précédemment cités. Dans un premier temps, il observe que le ratio O/U influence plus les systèmes $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle\{110\}$ que $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle\{100\}$ (voir figure 2.18). D'autre part il observe une forte diminution de la contrainte d'écoulement sur polycristaux lorsque ce rapport augmente. Ils expliquent que lors du glissement des dislocations, il est souvent nécessaire d'avoir 5 systèmes indépendants pour accommoder la déformation. Or le mode $\{100\}$, le plus mou, n'en fournit que 3, il faut donc piocher deux autres systèmes dans un autre mode, par exemple, le mode dur $\{110\}$. Comme l'oxydation du matériau modifie significativement l'activation des systèmes $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle\{110\}$ et pas beaucoup les systèmes $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle\{100\}$, la forte réduction de contrainte en augmentant la proportion stœchiométrique vient de l'adoucissement des systèmes du mode $\{110\}$. Finalement, En supposant que le mécanisme est de type double-décrochements, il attribue l'adoucissement à la diminution de l'énergie de formation de double-décrochements pour les systèmes $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle\{110\}$. Ceci est en accord avec les résultats de simulation de [Soulié et al. \(2018\)](#) qui montrent que les double-décrochements bougent plus facilement en proportion sur-stœchiométrique.

2.6. Positionnement de la thèse

En résumé, pour aider à la compréhension du comportement viscoplastique des pastilles, nous étudions dans cette thèse le mécanisme de déformation par glissement des dislocations. En effet, ce mécanisme joue un rôle important dans l'accommodation des déformations du combustible lors des rampes de puissance où des dilatations thermiques et du gonflement gazeux surviennent dans la pastille. Pour cela il est nécessaire de comprendre le comportement des dislocations à l'échelle des grains pour lesquels beaucoup de questions sur les mécanismes de glissement et la participation des différents modes subsistent (en particulier pour le mode $\{111\}$).

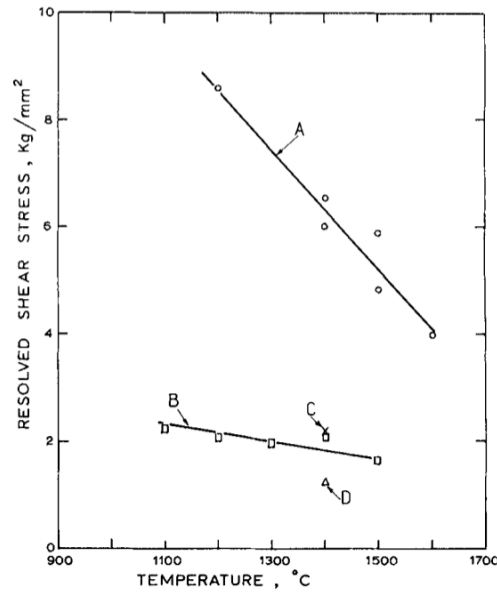


figure 2.18 : Dépendance de la CRSS des systèmes $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{100\}$ et $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{110\}$ en fonction de la stœchiométrie. (A) glissement sur $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{110\}$ avec O/U=2,001, (B) glissement sur $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{110\}$ avec O/U=2,10, (C) glissement sur $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{100\}$ avec O/U=2,001, (D) glissement sur $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{100\}$ avec O/U=2,10 [Nadeau (1969)]

C'est pourquoi nous présentons dans le chapitre 3 le modèle de plasticité cristalline que nous avons utilisé et dont les paramètres ont été identifiés sur des données expérimentales. En utilisant la simulation par éléments finis (EF) des tests de compression sur monocristaux, nous analysons l'activation des différents systèmes à travers la comparaison de l'anisotropie viscoplastique du matériau entre la simulation et l'expérience. Cela nous permet d'acquérir de nouveaux résultats pour discuter de la contribution du mode $\{111\}$, et d'établir une validation du modèle viscoplastique à l'échelle du monocristal.

Dans le chapitre 4, nous complétons l'identification du modèle de plasticité cristalline de l' UO_2 en calculant les coefficients de la matrice d'interaction. Cette dernière nous permettant d'améliorer la modélisation de l'écrouissage lié à l'interaction entre dislocations. Cela semble particulièrement nécessaire dans les polycristaux pour pouvoir prendre en compte l'effet Hall-Petch lié à la présence des joints de grains. De plus, nous identifions dans ce chapitre l'effet de ces interactions entre dislocations dans les monocristaux où la déformation est gouvernée par le glissement activé thermiquement.

Finalement, dans le chapitre 5, les travaux sur la simulation des polycristaux sont présentés avec la comparaison aux résultats expérimentaux pour la validation. Pour cela nous nous attachons à décrire dans la simulation les dislocations géométriquement nécessaires (GNDs), traduisant l'effet Hall-Petch avec les dislocations stockées du fait de l'incompatibilité de déformation aux joints de grains. Les GNDs nous permettront d'évaluer la dépendance de la contrainte d'écoulement à la taille de grain et également

l'écrouissage observé expérimentalement sur les courbes de compression. Cette validation sera conduite aux échelles macroscopique et microscopique avec respectivement les contraintes d'écoulement, mesurées dans des essais à vitesse de déformation imposée, et la rotation intra-granulaire mesurée après les essais de compression à l'aide de l'EBS (Electron BackScatter Diffraction). L'analyse des résultats dans des conditions température-vitesse de déformation représentatives des transitoires de puissance permettra d'établir un premier bilan de la validation et de dégager les questions restantes et les voies d'amélioration possibles.

3. Comportement viscoplastique du monocristal d'UO₂

Le but de ce chapitre est d'étudier le comportement viscoplastique du monocristal d'UO₂ à partir de la simulation par éléments finis (EF). Pour cela, un modèle de plasticité cristalline proposé initialement par [Soulacroix \(2014\)](#) est modifié afin de restituer au mieux les essais de compression sur monocristaux issus de la littérature. Notons que cette étude a été publiée [[Portelette et al. \(2018\)](#)].

Sommaire

3.1. Formulation du comportement non linéaire local	42
3.1.1. Méthode éléments finis	42
3.1.2. Modèle de plasticité cristalline de l'UO ₂	43
3.1.3. Récapitulatif des équations constitutives du modèle	48
3.2. Identification des paramètres du modèle	49
3.2.1. Méthode d'ajustement des paramètres	49
3.2.2. Détails des données exploitables	50
3.2.3. Résultats de l'ajustement des paramètres du modèle	55
3.3. Simulation éléments finis des essais de compression sur monocristaux	58
3.3.1. Description des essais de référence	58
3.3.2. Méthodologie des simulations EF	61
3.3.3. Résultats des simulations EF	64
3.3.4. Discussions et analyses	73
3.4. Conclusions	77

3.1. Formulation du comportement non linéaire local

Afin d'étudier des essais mécaniques impliquant la déformation des matériaux, la mécanique des milieux continus (MMC) est très utilisée. Une description de la technique est donnée par [Lemaitre et Chaboche \(1996\)](#). Dans notre cas, on se situe dans une modélisation des essais de compression sur monocristaux impliquant une formulation quasi-statique avec des forces à distance négligeables. La solution de l'équilibre pour la mécanique des solides déformables est donnée par la divergence des contraintes $\bar{\sigma}$ égale à zéro en tout point M d'un domaine appelé Ω :

$$\forall M \in \Omega, \overrightarrow{\text{div}}(\bar{\sigma}) = \vec{0} \quad (3.1)$$

De plus, la solution doit vérifier les conditions aux limites imposées. En surface du domaine $\partial\Omega$, le vecteur contrainte $\vec{T}_d$ et les déplacements $\vec{u}_d$ sont connus respectivement sur les frontières $\partial\Omega_F$ et $\partial\Omega_u$.

$$\begin{cases} \forall M \in \partial\Omega_F, \bar{\sigma} \cdot \vec{n} = \vec{T}_d \\ \forall M \in \partial\Omega_u, u = \vec{u}_d \end{cases} \quad (3.2)$$

Il est important de noter que la contrainte locale a une dépendance non linéaire avec les déplacements via les déformations du milieu continu :

$$\bar{\sigma} = f\left(\bar{\varepsilon}(\bar{\nabla} \vec{u})\right) \quad (3.3)$$

Les déformations totales du milieu continu doivent être compatibles en dérivant du champ de déplacement par une formulation ad-hoc. Dans notre cas nous utiliserons une description en grandes transformations décrite au paragraphe 3.1.2.

3.1.1. Méthode éléments finis

La résolution des équations (3.1) à (3.3) peut se faire en utilisant la méthode des EF qui discrétise l'espace Ω avec un maillage permettant l'interpolation des déplacements, inconnus du problème, à l'aide des fonctions de forme. Ces dernières constituent une base d'approximation pour la solution du problème mathématique (3.1), (3.2) et (3.3). Le passage d'un système continu à un système discret repose sur une formulation intégrale de l'équation (3.1) et le théorème de la divergence traduisant mathématiquement le principe des travaux virtuels. Ce dernier permet d'exprimer l'égalité entre les travaux des forces internes et externes. Ainsi la solution des équations (3.1) à (3.3), dans un système discret, est décrite par une relation entre les déplacements $\{U\}$ et les forces $\{F_{ext}\}$ aux nœuds du maillage (voir équation (3.4)). La matrice $[K]$ décrit la raideur non linéaire du système.

$$[K] \cdot \{U\} = \{F_{ext}\} \quad (3.4)$$

La linéarisation de l'équation (3.4) et l'utilisation d'une méthode de type « Newton » permet de trouver la solution de manière itérative avec la formulation EF suivante :

$$[K^r] \cdot \{\delta U\}^i = \{R\}^{i-1} \quad (3.5)$$

$\{\delta U\}^i$ représente la variation de déplacement, par rapport à l'itération précédente, permettant avec l'opérateur de recherche $[K^r]^\dagger$ d'annuler le résidu $\{R\}^{i-1}$ représentant la différence entre la force imposée $\{F_{ext}\}$ et les forces internes $\{F_{int}\}^{i-1}$ à l'itération précédente.

$$\{R\}^{i-1} = \{F_{ext}\} - \{F_{int}\}^{i-1} \quad (3.6)$$

Par la suite, jusqu'à ce que le résidu converge vers une valeur choisie proche de 0, les déplacements sont mis à jour à chaque itération :

$$\{U\}^i = \{U\}^{i-1} + \{\delta U\}^i \quad (3.7)$$

ainsi que les contraintes :

$$\bar{\sigma}^i = g(\bar{\varepsilon}(U^i)) \quad (3.8)$$

et les forces internes :

$$\{F_{int}\}^i = h(\bar{\sigma}^i) \quad (3.9)$$

La description complète de l'algorithme de convergence proposé dans le code EF Cast3M [Commissariat à l'énergie atomique (CEA)] est donnée dans la référence [Michel et al. (2018)].

3.1.2. Modèle de plasticité cristalline de l'UO₂

La méthodologie présentée ici repose sur l'utilisation du code de calcul EF Cast3M dans lequel nous avons implémenté notre propre loi de comportement viscoplastique du matériau permettant de calculer les contraintes en fonction du gradient des déplacements en chaque point d'intégration du maillage (équation (3.3)). Pour cela on utilise une formulation en transformation finie permettant de prendre en compte précisément l'évolution de l'orientation du réseau cristallin dans le cas de la plasticité [Lemaitre et Chaboche (1996), Amodeo et al. (2016), Ling et al. (2016)]. Le principe de cette technique est de considérer les grandes déformations et grands déplacements (à

[†] Cet opérateur de recherche est basé sur le comportement mécanique élastique dans le cas de Cast3M qui utilise un schéma de Newton modifié.

l'inverse de l'hypothèse des petites perturbations (HPP)) à l'aide de la décomposition élastique-plastique de Kröner-Lee du gradient de la transformation [Kroner (1960), Lee (1969), Mandel (1973)].

Le tenseur gradient de la transformation $\bar{\bar{F}}$ est issu du gradient du vecteur déplacement (voir équation (3.10)).

$$\bar{\bar{F}} = \bar{\bar{I}} + \bar{\bar{V}}(\vec{u}) \quad (3.10)$$

Ce tenseur définit la variation de distance $d\vec{x}$ entre deux points du milieu continu au cours de la sollicitation à partir de la distance de référence de ces deux mêmes points $d\vec{X}$:

$$d\vec{x} = \bar{\bar{F}} \cdot d\vec{X} \quad (3.11)$$

La décomposition de Kröner-Lee implique la décomposition de $\bar{\bar{F}}$ en une partie élastique $\bar{\bar{F}}^e$ et en une partie plastique $\bar{\bar{F}}^p$ (voir équation (3.12)) comme l'illustre la figure 3.1. Cela implique la définition d'une configuration de référence C_0 , d'une configuration courante C_t et d'une configuration isoclinique C^* défini par Mandel.

$$\bar{\bar{F}} = \bar{\bar{F}}^e \cdot \bar{\bar{F}}^p \quad (3.12)$$

Chacun des trois tenseurs gradients de la transformation ($\bar{\bar{F}}$, $\bar{\bar{F}}^e$ et $\bar{\bar{F}}^p$) peuvent également être décomposés en un tenseur de rotation $\bar{\bar{R}}$ et en un tenseur de dilatation que subit le cristal au cours de la transformation ($\bar{\bar{U}}$ est le tenseur des dilations droit si $\bar{\bar{F}} = \bar{\bar{R}} \cdot \bar{\bar{U}}$ – $\bar{\bar{V}}$ est le tenseur des dilatations gauche si $\bar{\bar{F}} = \bar{\bar{V}} \cdot \bar{\bar{R}}$ voir figure 3.2). Cette décomposition est dite polaire.

Notons que lorsque le tenseur gradient de la transformation tend vers zéro, cela est équivalent à une approche en petites perturbations où le tenseur des déformations totales, donné par la partie symétrique du gradient de déplacement, est égal au tenseur des déformations élastiques plus le tenseur des déformations plastiques ($\bar{\bar{\epsilon}} = \bar{\bar{\epsilon}}^e + \bar{\bar{\epsilon}}^p$). De même, le tenseur des rotations totales, donné par la partie antisymétrique du gradient de déplacement, est égal au tenseur des rotations élastiques plus le tenseur des rotations plastiques ($\bar{\bar{\omega}} = \bar{\bar{\omega}}^e + \bar{\bar{\omega}}^p$). En plasticité cristalline, le tenseur de rotation plastique exprimé dans la base initiale du cristal est nul. Ainsi, le tenseur des rotations élastiques est égal au tenseur des rotations totales.

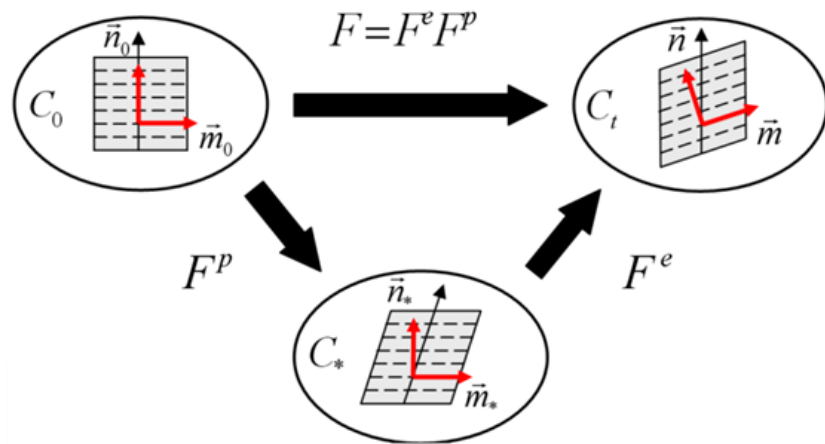


figure 3.1 : Décomposition de Kröner-Lee du gradient Lagrangien de la transformation [Kroner (1960), Lee (1969), Mandel (1973)]

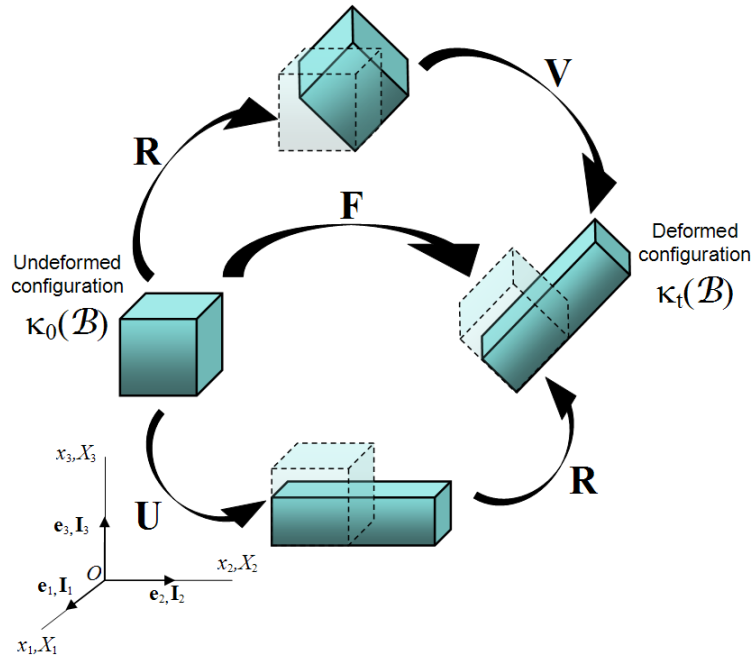


figure 3.2 : Décomposition polaire du tenseur gradient de la transformation $\bar{\bar{F}}$

Le gradient de vitesse $\bar{\bar{L}}$, nécessaire pour le calcul de la puissance des efforts internes peut être exprimé à partir de l'équation (3.12) par l'équation (3.13) avec $\bar{\bar{L}}^e = \dot{\bar{\bar{F}}}^e \cdot \bar{\bar{F}}^e{}^{-1}$ la partie élastique du gradient de vitesse dans C_t et $\bar{\bar{L}}^p = \dot{\bar{\bar{F}}}^p \cdot \bar{\bar{F}}^p{}^{-1}$ la partie plastique dans C^* .

$$\bar{\bar{L}} = \dot{\bar{\bar{F}}} \cdot \bar{\bar{F}}^{-1} = \bar{\bar{L}}^e + \bar{\bar{F}}^e \cdot \bar{\bar{L}}^p \cdot \bar{\bar{F}}^e{}^{-1} \quad (3.13)$$

La décomposition du gradient de vitesse (3.13) utilisée dans le calcul de la puissance des efforts internes (3.14) se traduit par une puissance réversible ($\frac{1}{\rho_0} \bar{\bar{\pi}} : \bar{\bar{E}}_{GL}^e$) et une puissance irréversible ($\frac{1}{\rho_0} \bar{\bar{M}} : \bar{\bar{L}}^p$).

$$\bar{\bar{\sigma}} : \bar{\bar{L}} = \frac{1}{\rho_0} \bar{\bar{\pi}} : \bar{\bar{E}}_{GL}^e + \frac{1}{\rho_0} \bar{\bar{M}} : \bar{\bar{L}}^p \quad (3.14)$$

La partie réversible (ou élastique) du comportement est basée sur la loi hyper-élastique de Saint-Venant Kirchhoff dans la configuration intermédiaire C^* (équation (3.15)) qui relie le second tenseur des contraintes de Piola-Kirchhoff $\bar{\bar{\pi}}$ au tenseur des déformations élastiques de Green-Lagrange $\bar{\bar{E}}_{GL}^e = \frac{1}{2} (\bar{\bar{F}}^e{}^T \bar{\bar{F}}^e - \bar{\bar{I}})$.

$$\bar{\bar{\pi}} = \bar{\bar{C}} : \bar{\bar{E}}_{GL}^e \quad (3.15)$$

Dans l'équation précédente, $\bar{\bar{C}}$ représente le tenseur d'élasticité du matériau. Par ailleurs, le tenseur de Cauchy peut être exprimé en fonction du second tenseur des contraintes de Piola-Kirchhoff $\bar{\bar{\pi}}$ (équation (3.16)).

$$\bar{\bar{\sigma}} = \frac{1}{\det(\bar{\bar{F}}^e)} \bar{\bar{F}}^e \cdot \bar{\bar{\pi}} \cdot \bar{\bar{F}}^e{}^T \quad (3.16)$$

Concernant la partie plastique, le gradient de vitesse plastique $\bar{\bar{L}}^p$ est calculé comme la somme des vitesses de cisaillement des N_s systèmes de glissement (voir équation (3.17)). Cette dernière utilise le tenseur de Schmid du système s $\bar{\bar{\mu}}^s = \bar{\bar{b}}^s \otimes \bar{\bar{n}}^s$, permettant de définir la direction et le plan de glissement dans lesquels s'effectuent le cisaillement.

$$\bar{\bar{L}}^p = \dot{\bar{\bar{F}}}^p \bar{\bar{F}}^p{}^{-1} = \sum_{s=1}^{N_s} \dot{\gamma}^s \cdot \bar{\bar{\mu}}^s = \sum_{s=1}^6 \overbrace{\dot{\gamma}^s \cdot \bar{\bar{\mu}}^s}^{\{100\}} + \sum_{s=7}^{12} \overbrace{\dot{\gamma}^s \cdot \bar{\bar{\mu}}^s}^{\{110\}} + \sum_{s=13}^{24} \overbrace{\dot{\gamma}^s \cdot \bar{\bar{\mu}}^s}^{\{111\}} \quad (3.17)$$

$\dot{\gamma}^s$ est définie par la loi d'Orowan (équation (3.18)) comme étant la vitesse de cisaillement et dépend de la vitesse v^s et de la densité ρ_m^s des dislocations mobiles sur le système s .

$$\dot{\gamma}^s = \rho_m^s b v^s \quad (3.18)$$

La vitesse de dislocation utilisée considère un mécanisme thermiquement activé. Cette loi de vitesse, équation (3.19), a été proposée par [Soulacroix \(2014\)](#) pour rendre compte des résultats expérimentaux de l'UO₂.

$$v^s = v_D b \exp\left(-\frac{\Delta H_0^i}{k_b T}\right) \left(\cosh\left(\frac{\tau^s}{\tau_0^i}\right) - 1\right) \text{signe}(\tau^s) \quad (3.19)$$

Dans cette équation, on note les paramètres ΔH_0^s qui représente la barrière d'énergie à contrainte nulle pour chaque mode de glissement i , et τ_0^i qui représente la contrainte critique que doit dépasser la contrainte résolue τ^s . Toutefois, la forme empirique de la loi (discutée plus loin) ne permet pas une interprétation physique de ces paramètres. La contrainte de cisaillement résolue τ^s appliquée au système s est donnée en équation (3.20) en fonction du tenseur de Schmid correspondant et du tenseur des contraintes de Mandel $\bar{\bar{M}}$ donné en équation (3.21).

$$\tau^s = \bar{\bar{M}} : \bar{\mu}^s \quad (3.20)$$

$$\bar{\bar{M}} = \bar{\bar{F}}^e{}^T \cdot \bar{\bar{F}}^e \cdot \bar{\pi} \quad (3.21)$$

Enfin, le terme $v_D = 4,94 \times 10^{13} \text{s}^{-1}$, dans l'équation (3.19), représente la fréquence de Debye déduite de la valeur de température de Debye propre à l'UO₂ avec la relation par $v_D = \theta_D / (h \cdot k_B)$ (avec h la constante de Plank et $\theta_D = 377 \text{ K}$ d'après [Willis \(1963\)](#), [Koc et al. \(2011\)](#) et [Eser et al. \(2014\)](#)).

Étant donné que le mécanisme thermiquement activé n'est pas encore clairement connu pour l'UO₂, il est tout à fait légitime d'utiliser une loi empirique (3.19) déjà éprouvée dans des comparaisons de simulation EF avec l'expérience [[Soulacroix \(2014\)](#)]. Cette loi est empirique car elle est basée sur une formulation en loi puissance (équation (3.22)) en séparant l'aspect thermique de l'aspect contrainte, comme présenté dans la section 2.1 page 18.

$$v^s = v_D b \exp\left(-\frac{\Delta H_0^i}{k_b T}\right) \left|\frac{\tau^s}{\tau_0^i}\right|^n \text{signe}(\tau^s) \quad (3.22)$$

Dans cette même section du chapitre 2, il a été rappelé qu'à fortes contraintes il est préférable d'utiliser une loi de type exponentielle qui permet de représenter l'évolution de l'exposant de la contrainte observée pour les lois puissance. Pour la plasticité

cristalline, ce passage de loi puissance à exponentiel est parfois utilisé [Sellars et McTegart (1966), Jonas et al. (1969)]. Alors, l'équation (3.22) devient :

$$v^s = v_D b \exp\left(-\frac{\Delta H_0^i}{k_b T}\right) \exp\left(\frac{\tau^s}{\tau_0^i}\right) \text{signe}(\tau^s) \quad (3.23)$$

Cependant, afin de vérifier que la vitesse de cisaillement est nulle à contrainte nulle, il est préférable d'utiliser un sinus hyperbolique.

$$v^s = v_D b \exp\left(-\frac{\Delta H_0^i}{k_b T}\right) \sinh\left(\frac{\tau^s}{\tau_0^i}\right) \text{signe}(\tau^s) \quad (3.24)$$

Et finalement, une loi utilisant un cosinus hyperbolique a été choisie car la dépendance à la contrainte pour des faibles contraintes est plus faible que le sinus hyperbolique[‡]. Nous exprimerons donc dans la suite la vitesse de cisaillement de chaque système en fusionnant l'équation de vitesse de cisaillement choisie (équation (3.19)) avec la formule d'Orowan (équation (3.18)) :

$$\dot{\gamma}^s = \rho_m^s v_D b^2 \exp\left(-\frac{\Delta H_0^i}{k_b T}\right) \left(\cosh\left(\frac{\tau^s}{\tau_0^i}\right) - 1\right) \text{signe}(\tau^s) \quad (3.25)$$

Pour le calcul EF avec Cast3M, la loi de comportement est implémentée par l'intermédiaire de l'outil d'intégration des données matériaux MFront [Helfer et al. (2015), T. Helfer]. Dans ce dernier, l'intégration de la loi de comportement est réalisée à l'aide d'un schéma implicite utilisant une méthode de type Newton-Raphson. Les variables internes de cette loi de comportement sont le tenseur de déformation de Green-Lagrange et les vitesses de cisaillement des 24 systèmes de glissement. Par la suite, les jacobiens sont calculés numériquement grâce à l'option *@Algorithm NewtonRaphson_NumericalJacobian* de MFront (voir Annexe A).

3.1.3. Récapitulatif des équations constitutives du modèle

$$\begin{aligned} \bar{\sigma} &= \frac{1}{\det(\bar{F}^e)} \bar{F}^e \cdot \bar{\pi} \cdot \bar{F}^{eT} \\ \bar{\pi} &= \bar{\bar{C}} : \bar{E}_{GL}^e \\ \bar{F} &= \bar{F}^e \cdot \bar{F}^p \\ \bar{L}^p &= \dot{\bar{F}}^p \bar{F}^{p-1} = \sum_{s=1}^{N_s} \dot{\gamma}^s \cdot \bar{\mu}^s \end{aligned}$$

[‡] Le développement de Taylor du premier ordre proche de 0 conduit à une fonction linéaire pour $\exp(x)$ et $\sinh(x)$ tandis que la fonction est nulle pour un $\cosh(x)-1$

$$\bar{\bar{M}} = \bar{\bar{F}}^e{}^T \cdot \bar{\bar{F}}^e \cdot \bar{\bar{n}}$$

$$\tau^s = \bar{\bar{M}} : \bar{\bar{\mu}}^s$$

$$\bar{\bar{\mu}}^s = \vec{b}^s \otimes \vec{n}^s$$

$$\dot{\gamma}^s = \rho_m^s \nu_D b^2 \exp\left(-\frac{\Delta H_0^i}{k_b T}\right) \left(\cosh\left(\frac{\tau^s}{\tau_0^i}\right) - 1\right) \text{signe}(\tau^s)$$

3.2. Identification des paramètres du modèle

3.2.1. Méthode d'ajustement des paramètres

Le modèle viscoplasticité ayant été formulé dans la section précédente, il convient maintenant d'identifier les paramètres ρ_m^s , ΔH_0^i and τ_0^i de l'équation (3.25). Pour cela nous utilisons les données expérimentales issues de tests de compression à vitesse de déformation imposée sur monocristaux permettant d'évaluer les CRSS pour chaque mode de glissement en fonction de la température. Sur ces données nous ferons une minimisation par la méthode des moindres carrés de l'équation (3.26) issue de l'expression de τ^s en fonction de la température à partir de l'équation (3.25). Cela implique de faire plusieurs hypothèses :

- Les données expérimentales sont considérées comme étant du glissement simple car, de manière générale, on considère que les CRSS sont calculées aux premiers stades de la déformation où un seul système est activé. Cette hypothèse peut parfois être assez forte sachant que certaines données expérimentales dont nous disposons sont prises à des niveaux de déformations de l'ordre de 1 ou 2%.
- Nous faisons également l'hypothèse que $\dot{\epsilon} = \dot{\epsilon}^{vp} = \dot{\gamma}^s \cdot f^s$ où f^s représente le facteur de Schmid du système s . Ceci peut être également une hypothèse forte qui suppose qu'un seul système peut accommoder la déformation totale.
- Finalement, pour simplifier les calculs, nous considérons dans l'équation (3.6) que $\dot{\epsilon} = 10^{-4} s^{-1}$. Ceci ne constitue pas une forte approximation car les vitesses des données expérimentales sélectionnées pour cette étude sont proches de la valeur choisie. De plus, la variation de la vitesse dans l'équation (3.26) influence peu la réponse en τ^s . De même, pour simplifier les calculs, nous considérons que $f^s = 0,5$ ce qui n'est pas une forte approximation étant donné que les systèmes sont activés seuls lorsque leur facteur de Schmid est proche de leur valeur maximale et la variation de ce paramètre influence très peu le calcul de τ^s .

$$\tau^s = \tau_0^i \cdot \cosh^{-1} \left(1 + \frac{\dot{\epsilon}}{f^s \rho_m^s \nu_D b^2 e^{-\frac{\Delta H_0^i}{k_b T}}} \right) \quad (3.26)$$

3.2.2. Détails des données exploitables

Dans cette section, nous faisons l'inventaire des données de CRSS disponibles en fonction de la température sur monocristaux d'UO₂. Les données expérimentales avec des CRSS proches les unes des autres seront sélectionnées pour la calibration des paramètres du modèle sur les modes de glissement {100} et {110}.

Il est donc nécessaire, dans un premier temps, d'extraire de la littérature l'ensemble des essais de compression sur monocristaux pour lesquels les CRSS sont données ou lorsqu'il est possible de les extraire directement à partir de la loi de Schmid [Byron (1968a), Nadeau (1969), Yust et McHargue (1969), Sawbridge et Sykes (1971), Seltzer et al. (1972), Lefebvre (1976)]. Certaines de ces données ont été écartées du fait de leurs conditions de chargement trop spécifiques par rapport aux autres données (par exemple les cas de fortes vitesses de déformation par rapport aux autres essais).

3.2.2.1. CRSS des systèmes de glissement $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{100\}$

Le tableau 3.1 répertorie toutes les données expérimentales disponibles pour le mode de glissement {100} et celles qui ont été retenues sont marquées en vert. Le tracé de ces CRSS en fonction de la température est donné sur la figure 3.3.

Les données retenues de Lefebvre (1976) nommées Lef3 et Lef4 dans le tableau 3.1 et de Byron (1968a) nommées Byr2 permettent d'avoir des CRSS pour une large gamme de température. Les CRSS de Lefebvre sont, en général, plus faibles que celles de Byron mais nous n'avons pas pu identifier la cause de cette différence.

Les données de Sawbridge et Sykes (1971) font également parties des données retenues. En effet, ce sont les seules données pour lesquelles nous avons toutes les informations des essais, et pour lesquels des résultats complets sont proposés. De plus ces données de CRSS ont été relevées après un stade 0 ce qui permet de capturer la CRSS du caractère le moins mobile. Néanmoins, elles ne concernent que la température de 1600 K. Enfin, les données de Nadeau (1969) ont également été retenues pour le mode {100} car malgré le manque d'informations laissées par les auteurs elles sont compatibles avec les CRSS précédemment mentionnées.

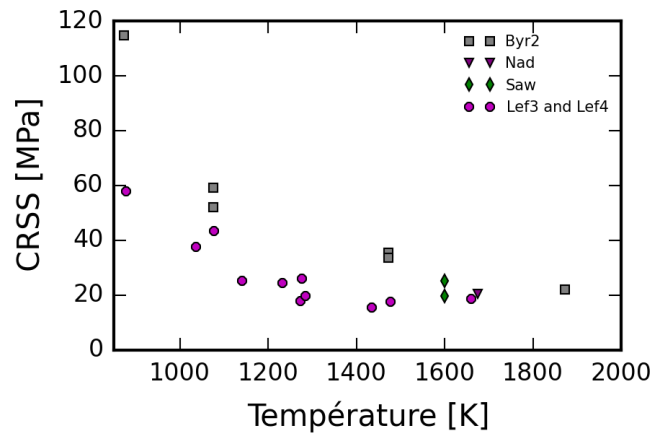


figure 3.3 : CRSS en fonction de la température des données retenues pour l'ajustement des paramètres du modèle pour les systèmes de glissement $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{100\}$.

tableau 3.1 : Description des conditions expérimentales des essais de [Lefebvre \(1976\)](#), [Nadeau \(1969\)](#), [Byron \(1968a\)](#), [Sawbridge et Sykes \(1971\)](#) et [Yust et McHargue \(1969\)](#). Les données en vert sont celles utilisées pour la détermination des paramètres du modèle pour les systèmes de glissement $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{100\}$. Les orientations sont référencées suivant la figure 3.4. Pour la géométrie, H et L font référence respectivement à la hauteur et la longueur du côté de la base d'un échantillon parallélépipédique et $\emptyset$ au diamètre des spécimens cylindriques. Finalement, Re fait référence à la limite élastique.

Nom	Orientation	O/U	T (K)	$\varepsilon(\%)$	$\dot{\varepsilon}(s^{-1})$	Géométrie
Lef1	(1),(2),(3)	1,993	973 - 1673	0,5		Parallélépipède L= ? et H = ?
Lef2	(4)	2,001	973 - 1673	0,3		
Lef3	[011]	2,0	973 - 1673	0,3	$1,5 \cdot 10^{-4}$	Cylindre R= ? et H = ?
Lef4	[011]	2,0	973 - 1673	0,3	$1,5 \cdot 10^{-4}$	Parallélépipède L= ? et H = ?
Nad		2,001	1373 - 1873			Parallélépipède L= 2-3 mm ; H = 8mm
Byr1	(1)	2,001	873 - 2073	Re	$3 \cdot 10^{-4}$	Parallélépipède L=2,4mm ; H=4,8mm
Byr2	(2)	2,001	873 - 2073	Re	$3 \cdot 10^{-4}$	Parallélépipède L=2,4mm ; H=4,8mm
Byr3	(3)	2,001	873 - 2073	Re	$3 \cdot 10^{-4}$	Parallélépipède L=2,4mm ; H=4,8mm
Saw	$\phi = 45^\circ$	2,00	1600	2	10^{-4}	Cylindrique $\emptyset=2,84\text{mm}$ et H=8mm
Yust	$\phi = 45^\circ$	2,00	823 - 1673		$1,4 \cdot 10^{-3}$ - $1,6 \cdot 10^{-1}$	

tableau 3.2 : Facteur de Schmid maximum des trois modes de glissement pour les orientations données dans le tableau 3.1

	Lef1 (1)	Lef1 (2)	Lef1 (3)	Lef2 (4)	Lef3 et Lef4 [011]	Byr1 (1)	Byr2 (2)	Byr3 (3)	Saw et Yust
{100}	0.41	0.47	0.49	0.39	0.35	0.38	0.50	0.31	0.5
{110}	0.35	0.28	0.05	0.36	0.25	0.25	0.13	0.43	0
{111}	0.46	0.45	0.30	0.45	0.41	0.42	0.37	0.50	0.22

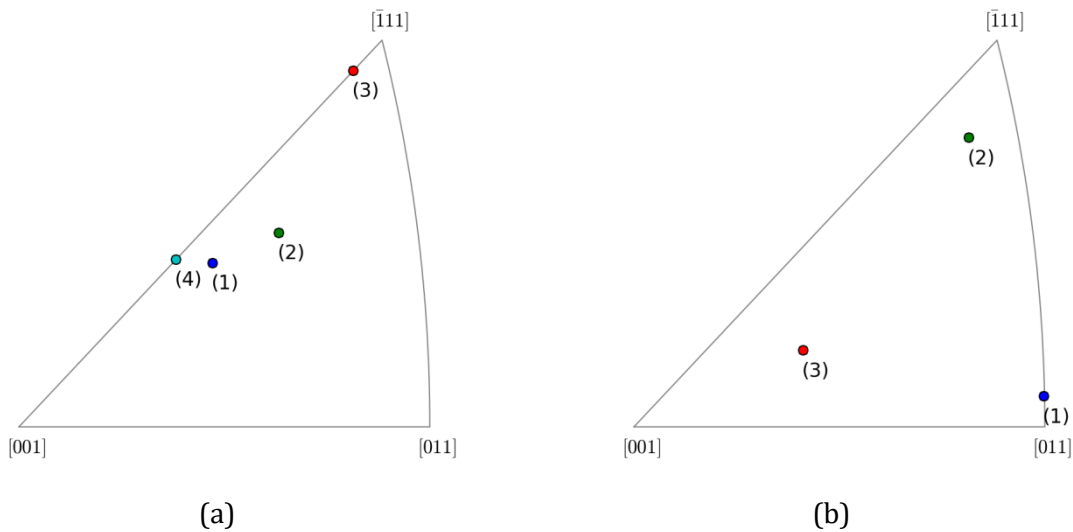


figure 3.4: Orientation cristalline des échantillons de compression réalisés par (a) Lefebvre (1976) pour son étude de la stœchiométrie (b) Byron (1968a)

Les autres données expérimentales décrites dans le tableau 3.1 n'ont pas été retenues pour les raisons suivantes :

- Données Lef1 : Les CRSS montrent une forte dispersion avec la température (voir figure 3.5) et ne sont pas compatibles avec les données retenues. D'après Lefebvre, cette différence est due aux impuretés de fluor dans les échantillons. De plus, le rapport O/U est loin de la proportion stœchiométrique.
- Données Lef2 et Byr3 : D'après leurs orientations cristallines, il est fort probable que la déformation soit également accommodée par les systèmes $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle\{110\}$ en plus des systèmes $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle\{100\}$.
- Données de Byr1 : Ces CRSS sont globalement en accord avec Byr2 (voir figure 3.6) mais sont moins en accord avec les données retenues car elles amplifient les incertitudes pour les faibles et les fortes températures.
- Données Yust : Les vitesses de déformation sont plus grandes que les autres données expérimentales et les profils de CRSS montrent une tendance inattendue qui augmente après 1200 K (voir figure 3.7).

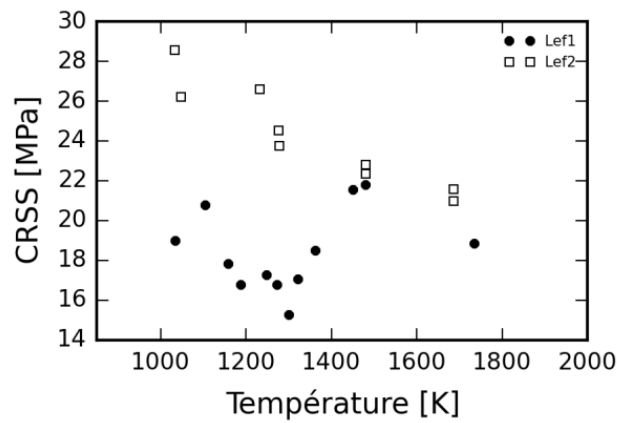


figure 3.5 : CRSS en fonction de la température – Comparaison entre Lef1 (cercles noirs) et Lef2 (carrés blanc) [Lefebvre (1976)] pour les systèmes de glissement $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{100\}$

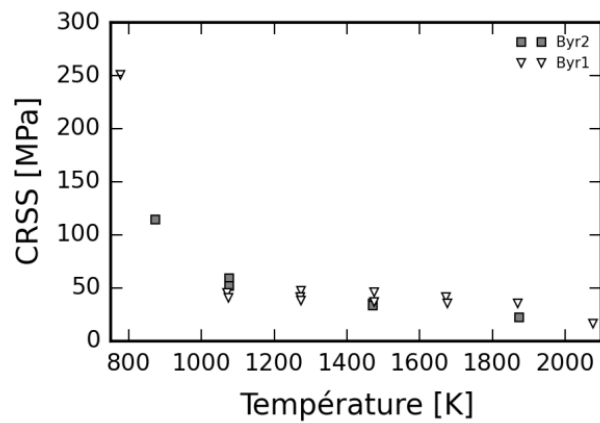


figure 3.6 : CRSS en fonction de la température - comparaison entre Byr1 et Byr2 [Byron (1968a)] pour les systèmes $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{100\}$

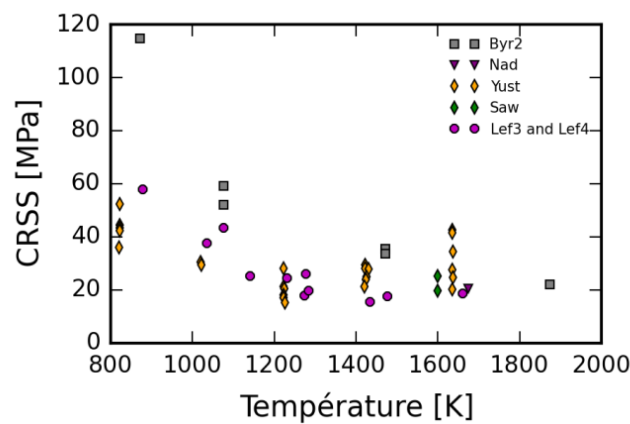


figure 3.7 : CRSS en fonction de la température – Comparaison des données Yust et McHargue (1969) comparées aux données retenues pour les systèmes $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{100\}$ (données en vert dans le tableau 3.1)

3.2.2.2. CRSS des systèmes de glissement $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle\{110\}$

Très peu d'auteurs ont étudié l'activation des systèmes $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle\{110\}$ pour l' UO_2 et parmi eux seulement quatre ont relevé des CRSS (voir tableau 3.3). Les données qui ont le plus de cohérence entre elles sont celles de [Sawbridge et Sykes \(1971\)](#) et de [Nadeau \(1969\)](#) (voir figure 3.8) qui avaient déjà une cohérence entre elles pour le mode $\{100\}$ en figure 3.3.

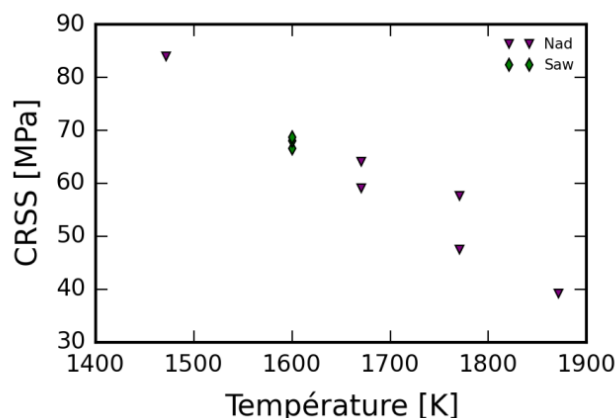


figure 3.8 : CRSS en fonction de la température des données retenues pour l'ajustement des paramètres du modèle pour les systèmes de glissement $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle\{110\}$.

Bien que l'étude de [Lefebvre \(1976\)](#) montre plusieurs essais de compression pour de larges gammes de température et de vitesse de déformation, les CRSS mesurées sont beaucoup plus faibles comparées à celles de [Sawbridge et Sykes \(1971\)](#), et [Nadeau \(1969\)](#) (voir figure 3.9). Ceci est probablement dû à un stade 0 plus marqué pour le mode $\{110\}$ que pour le mode $\{100\}$. En effet, les niveaux de déformation n'étant pas donnés dans l'étude de Lefebvre sur le mode $\{110\}$, on peut supposer qu'ils sont équivalents à ceux utilisés pour l'étude du mode $\{100\}$ par le même auteur (de l'ordre de 0,3% - 0,5%). À des niveaux de déformation aussi faibles la CRSS traduit l'activation du caractère le plus mobile et si la différence de mobilité est très différente la CRSS l'est aussi. De plus, [Sawbridge et Sykes \(1971\)](#) ont identifié un potentiel stade 0 plus grand pour le mode $\{110\}$ que pour le mode $\{100\}$.

Finalement, les données de [Seltzer et al. \(1972\)](#) ne sont pas retenues dû à la vitesse de déformation extrêmement faible ($<10^{-6} \text{ s}^{-1}$), comparées aux autres données, ne respectant plus les hypothèses faites pour l'utilisation de l'équation (3.26) (voir section 3.2.1). De plus, pour des vitesses aussi faibles il est probable que les mécanismes de diffusion soient prépondérants [[Ben Saada \(2017\)](#)].

tableau 3.3 : Description des conditions expérimentales des essais de [Lefebvre \(1976\)](#), [Nadeau \(1969\)](#), [Sawbridge et Sykes \(1971\)](#) et [Seltzer et al. \(1972\)](#). Les données en vert sont celles utilisées pour la détermination des paramètres du modèle pour les systèmes de glissement $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle\{110\}$. Pour la géométrie, H et L font référence respectivement à la hauteur et la longueur du côté de la base d'un échantillon parallélépipédique et $\varnothing$ au diamètre des spécimens cylindriques.

Nom	Orientation	O/U	T (K)	$\varepsilon(\%)$	$\dot{\varepsilon}(s^{-1})$	Géométrie
Lef {110}	[100] $\pm 6^\circ$	≈ 2	1173 - 1673		6.10^{-5} ; $1.5.10^{-4}$; 3.10^{-4} ; 6.10^{-4}	
Nad		2,001	1373 - 1873			Parallélépipède L= 2-3 mm ; H = 8mm
Saw	CA proche de [001]	2,00	1600	2	1.10^{-4}	Cylindre $\varnothing=2,84\text{mm}$ et H=8mm
Selt	[100]	2,002	1373 - 1573		5.10^{-9} - $1,4.10^{-6}$	Parallélépipède L = 3-2mm ; H = 8mm

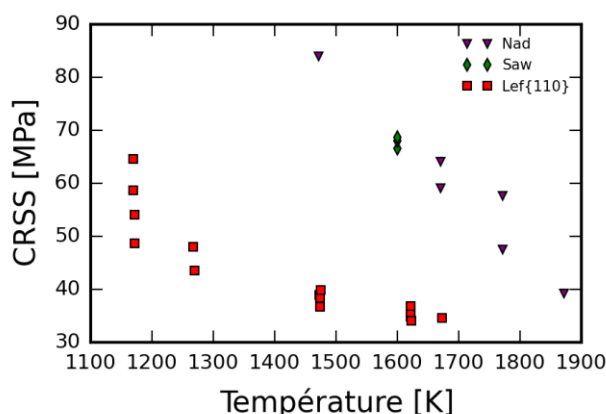


figure 3.9 : CRSS en fonction de la température des données Lef {110} [[Lefebvre \(1976\)](#)] comparées aux données retenues pour les systèmes $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle\{110\}$

3.2.3. Résultats de l'ajustement des paramètres du modèle

Les valeurs des paramètres du modèle issues de l'ajustement des données de CRSS en fonction de la température choisies dans la section précédente sont données dans le tableau 3.4. L'utilisation de ces paramètres dans l'équation (3.26) donne les courbes bleue et rouge de la figure 3.10 respectivement pour les systèmes $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle\{100\}$ et $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle\{110\}$.

Les valeurs de CRSS sont plus fortes pour les systèmes du mode {110} que pour le mode {100} montrant une activation plus faible du mode {110}. Cela est traduit par une valeur seuil τ_0^i plus forte. La dépendance de la CRSS à la température est plus marquée

pour les systèmes du mode $\{110\}$ que pour ceux du mode $\{100\}$. Cette dépendance ne dépend pas seulement de la valeur de ΔH_0 comme on pourrait le penser au premier abord. En effet, elle dépend du couple $\Delta H_0 - \tau_0$. Ceci est illustré sur la figure 3.11 où la variation de ces deux paramètres influence l'évolution de la CRSS en fonction de la température alors que le paramètre ρ_m^s a une influence négligeable.

tableau 3.4 : Paramètres du modèle pour les systèmes de glissement $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle\{100\}$ et $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle\{110\}$ issus de l'ajustement de CRSS en fonction de la température décrit section 3.2.1

	$\frac{1}{2}\langle 110 \rangle\{100\}$	$\frac{1}{2}\langle 110 \rangle\{110\}$
$\rho_m^s (\text{m}^{-2})$	$6,2 \cdot 10^{12}$	$9,2 \cdot 10^{11}$
$\Delta H_0^i (\text{eV})$	5,71	5,22
$\tau_0^i (\text{MPa})$	1,35	4,78

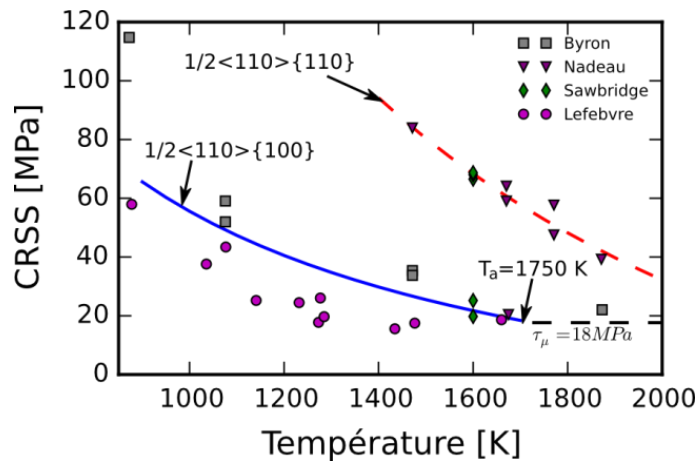
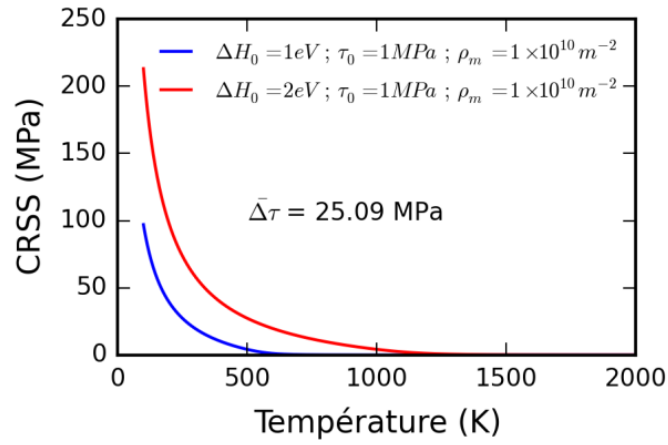


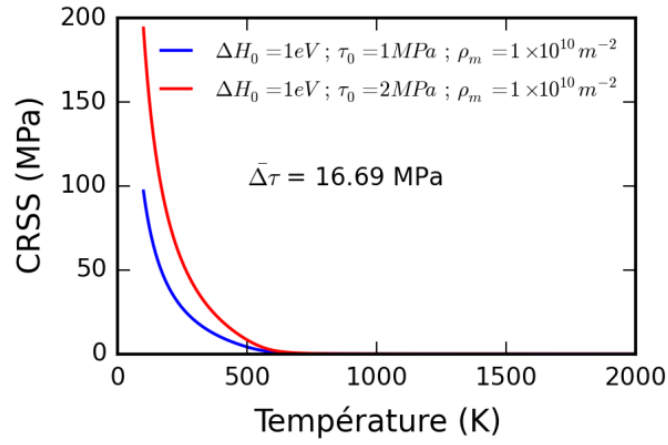
figure 3.10 : Profils des CRSS en fonction de la température obtenus lors de l'ajustement des données expérimentales pour les systèmes $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle\{100\}$ et $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle\{110\}$.

Pour le mode $\{100\}$ l'ajustement converge vers une contrainte interne $\tau_\mu = 18 \text{ MPa}$, qui est atteinte pour une température $T_a^{\{100\}} = 1750 \text{ K}$. Les données de $\{110\}$ ne permettent pas d'identifier de température de transition athermique mais en considérant une contrainte athermique de 18 MPa et une extrapolation des résultats, cette transition athermique est obtenue à une température $T_a^{\{110\}} = 2250 \text{ K}$. La contrainte interne représente la contrainte seuil de glissement dans le régime athermique du fait de l'interaction avec les défauts et/ou les dislocations. Il est donc tout à fait acceptable de considérer la même contrainte interne pour les deux modes.

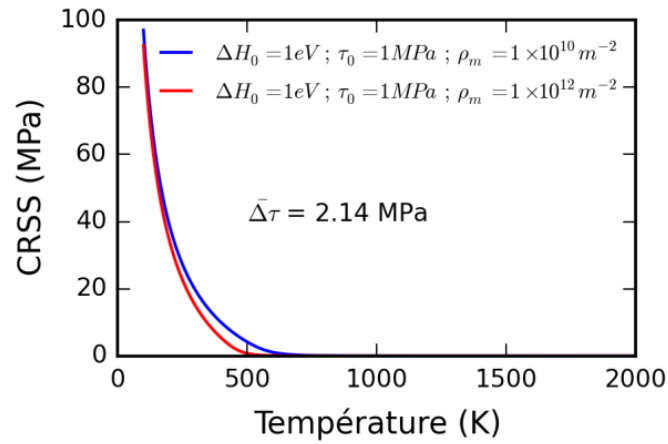
Notons que le paramètre ρ_m^s n'est pas directement mesurable et que sa signification physique attaché à la loi d'Orowan est perdu lorsque la vitesse de glissement est exprimée de façon empirique en fonction de la contrainte résolue et de la température, comme cela est le cas dans notre modèle. Dans notre cas ce paramètre permet un recalage global du pré-facteur pour chaque mode de glissement.



(a)



(b)



(c)

figure 3.11: Sensibilité des paramètres de l'équation (3.26) avec (a) pour la variation de ΔH_0 , (b) pour la variation de τ_0 et (c) pour la variation de ρ_m . Le $\overline{\Delta\tau} = \sqrt{\frac{\int_T (\tau_1 - \tau_2)^2 dT}{\int_T dT}}$ est la moyenne de l'écart quadratique des deux courbes

3.3. Simulation éléments finis des essais de compression sur monocristaux

3.3.1. Description des essais de référence

Sawbridge et Sykes (1971) ont réalisé des essais de compression uni-axiale sur monocristaux d'UO₂ afin de caractériser l'anisotropie viscoplastique du matériau. Pour cela ils ont fait plusieurs essais à température et vitesse de déformation constantes (1600 K et 10⁻⁴ s⁻¹) pour des échantillons avec différentes orientations cristallines.

Les orientations cristallines étudiées pour chaque échantillon sont montrées sur la figure de pôle inverse (FPI) de la figure 3.13. L'angle ϕ représente l'ensemble des orientations testées lorsque l'axe de compression (CA) se trouve dans le plan défini par [001] et $\bar{1}11$. Ces deux dernières directions correspondent à des valeurs de ϕ respectivement égales à 0° et 54.7°. Les auteurs ont également choisi d'étudier l'effet de l'orientation cristalline au centre de la FPI entre l'axe [011] et l'axe $\phi = 16^\circ$ qu'ils repèrent à l'aide d'un angle Ω .

En plus de l'anisotropie viscoplastique, ils ont caractérisé les systèmes actifs en analysant les traces de glissement à la surface des échantillons. Pour cela, deux plans perpendiculaires ont été découpés dans les éprouvettes cylindriques (voir illustration figure 3.12) et choisis de manière à pouvoir identifier le plan de glissement et la direction de cisaillement des systèmes observés.

La figure 3.14 présente les mesures de contrainte à 2% de déformation pour les orientations ϕ et Ω . Notons que lorsque les courbes de compression présentaient un adoucissement, ce n'est pas la valeur à 2% qui est prise mais la valeur maximale de la courbe avant 2%. Les courbes théoriques tracées sur la figure 3.14 sont issues du calcul de la contrainte à partir du facteur de Schmid maximum f_{max}^i du mode considéré ($i = \{100\}, \{110\}$ ou $\{111\}$) et d'une valeur de cisaillement critique τ_0^i :

$$\sigma = \frac{\tau_0^i}{f_{max}^i}$$

La valeur de τ_0^i est déterminée de manière à ajuster au mieux les données de contrainte dans les zones où les modes de glissement sont observés seuls. Par exemple, pour $\phi > 19^\circ$ seul le mode $\{100\}$ est observé ce qui a permis d'identifier une valeur de CRSS pour le mode $\{100\}$: $\tau_0^{\{100\}} = 27$ MPa. De la même manière, proche de $\phi = 0^\circ$, seul le mode $\{110\}$ est actif ainsi $\tau_0^{\{110\}} = 66$ MPa.

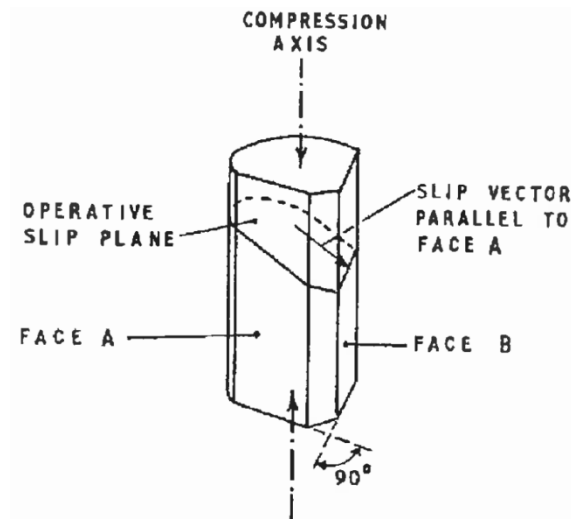


figure 3.12 : Représentation des échantillons des essais de [Sawbridge et Sykes \(1971\)](#) montrant la coupe des plans perpendiculaires (face A et face B) afin d'analyser les traces de glissement

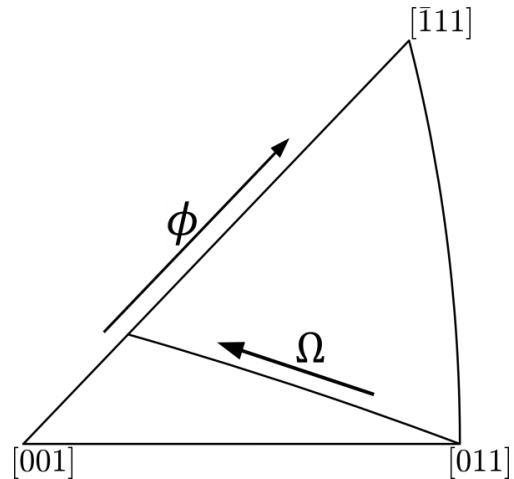
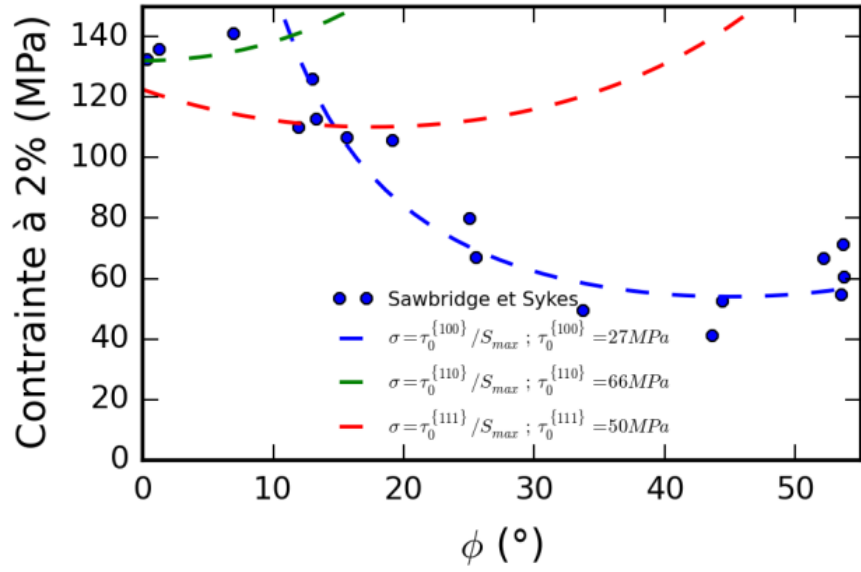


figure 3.13 : Définition des angles ϕ et Ω d'après [Sawbridge et Sykes \(1971\)](#)

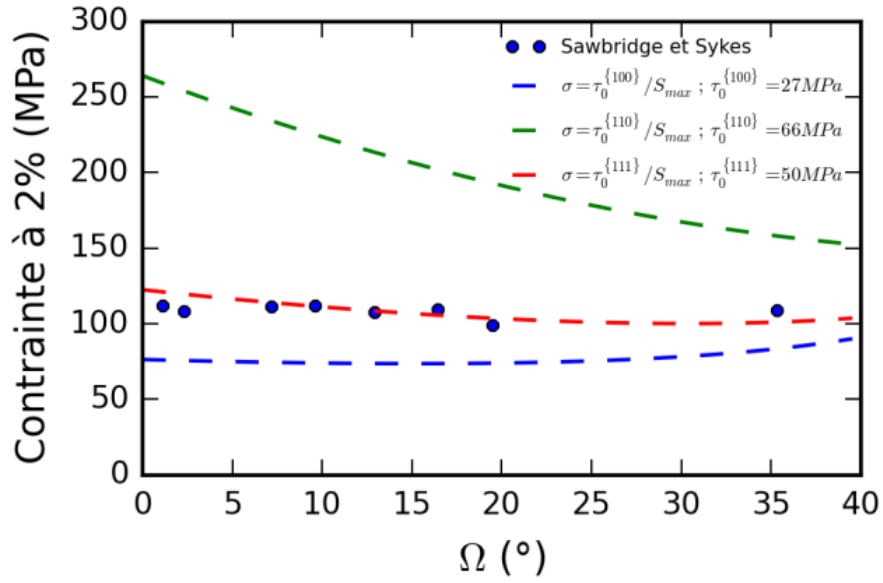
Concernant les orientations Ω , les traces glissements sont très sinueuses, il n'est pas possible d'identifier quel est le système activé. Il semblerait que ces traces sinueuses proviennent du glissement dévié/combinaison entre plusieurs systèmes appartenant à des modes de glissement différents (voir figure 2.11 page 31). De plus, les courbes théoriques calculées caractéristiques de l'activation des modes principaux ($\{100\}$ et $\{110\}$), ne coïncident pas avec les mesures de contrainte (voir figure 3.14). En revanche, la calibration de $\tau_0^{\{111\}} = 50$ MPa permet d'avoir une courbe théorique qui passe par les mesures de contrainte.

Cette valeur de contrainte seuil est problématique car elle est inférieure à celle du mode $\{110\}$, ce qui ne permet plus de passer par les mesures de contrainte pour des valeurs de ϕ faibles. De plus, pour les orientations Ω , la courbe théorique du mode $\{100\}$ est plus faible que celle du mode $\{111\}$. C'est donc les systèmes du mode $\{100\}$ qui devraient être activés.

Tout ceci montre que l'activation des différents modes de glissement est complexe, c'est pourquoi il est nécessaire d'utiliser la modélisation par EF qui est plus précise pour analyser leurs activations.



(a)



(b)

figure 3.14: Contrainte à 2% de déformation en fonction des orientations cristallines ϕ et Ω des essais expérimentaux de [Sawbridge et Sykes \(1971\)](#). Les tracés en point-tillés représentent les courbes théoriques de contrainte comme étant la contrainte critique τ_0^i du mode i ($i = \{100\}$, $\{110\}$ ou $\{111\}$) divisé par le facteur de Schmid maximum de l'ensemble des systèmes du mode considéré.

3.3.2. Méthodologie des simulations EF

L'analyse des résultats de Sawbridge et Sykes dans la section précédente montre que les CRSS proposées par ces auteurs sont discutables pour certaines orientations et qu'il est difficile de conclure du fait notamment des simplifications réalisées dans l'application du critère de Schmid. Nous proposons donc de revisiter leurs travaux avec un modèle de viscoplasticité cristalline le plus prédictif possible. C'est pourquoi nous simulons par éléments finis leurs essais à l'aide des outils Cast3M et MFront (exemple de modèle intégré dans MFront en Annexe A).

La géométrie utilisée pour simuler les essais de compression de [Sawbridge et Sykes \(1971\)](#) est parallélépipédique avec une base de $2,8 \times 2,8 \text{ mm}^2$ et une hauteur de 8 mm (voir le maillage EF en figure 3.15). Le maillage est composé de 350 éléments cubiques quadratiques comprenant 20 nœuds définis à l'aide de l'option 'ELEM' 'CU20' dans Cast3M. On applique un déplacement en compression suivant l'axe $\vec{z}$ sur les points de la surface supérieure et les points de la surface inférieure ont une condition de déplacements nuls suivant $\vec{z}$. Les points sur ces deux surfaces sont également bloqués en déplacement suivant les directions $\vec{x}$ et $\vec{y}$ afin de simuler un fort frottement entre l'échantillon et les cales de la machine de compression. Enfin, la totalité de l'échantillon est représentée avec les surfaces latérales libres, pour éviter des conditions de symétrie ne respectant pas l'anisotropie du matériau.

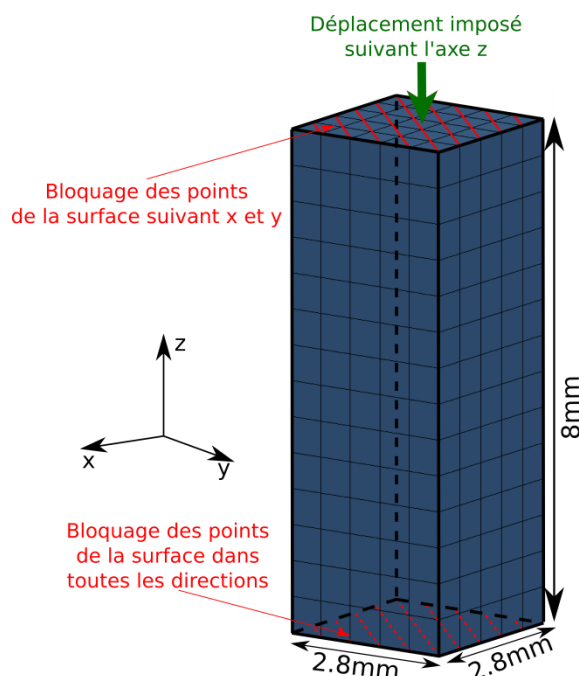


figure 3.15: Maillage éléments finis de l'éprouvette équivalente aux échantillons de [Sawbridge et Sykes \(1971\)](#).

L'élasticité du matériau est définie en prenant en compte les coefficients C_{11} , C_{12} et C_{44} issus de la convention de Voigt de la matrice d'élasticité d'un matériau cubique

orthotrope (voir équation (3.27)). Les valeurs de ces coefficients en fonction de la température sont issues de [Hutchings \(1987\)](#) (voir figure 3.16).

$$C_{ij} = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{12} & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} \end{pmatrix} \quad (3.27)$$

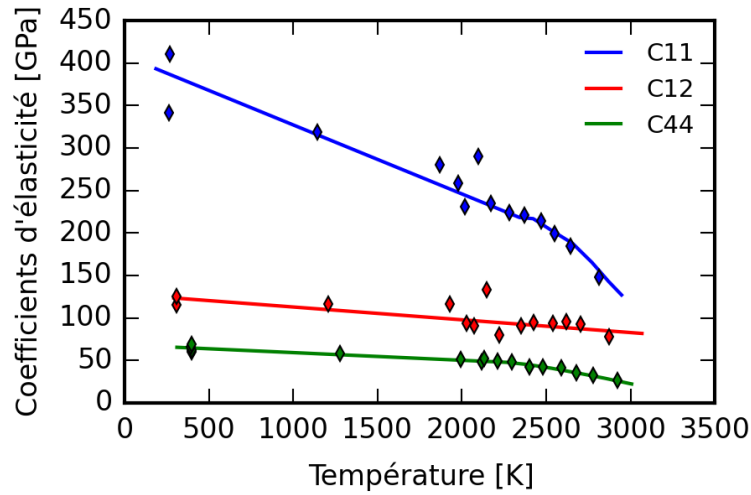


figure 3.16: Variation des constantes d'élasticité en fonction de la température d'après [Hutchings \(1987\)](#)

Des mesures de rotation du réseau cristallin ont été réalisées par [Sawbridge et Sykes \(1971\)](#) pour différentes orientations initiales afin de montrer que le glissement n'est pas équivalent dans toutes les directions. En effet, l'hétérogénéité du glissement sur les différents systèmes est corrélée à la rotation du réseau.

Pour illustrer cette remarque, considérons une éprouvette 2D sollicitée en traction pouvant glisser au niveau des mors. Si un seul système est actif pour accommoder la déformation, l'éprouvette sera cisailée par des plans de glissement qui mènent à une configuration désaxée par rapport à l'axe de traction (voir illustration sur la figure 3.17(a)). La réalité montre qu'il existe un fort frottement entre l'éprouvette et les mors ne permettant pas le glissement entre les deux surfaces. Cela revient à considérer la rotation de l'éprouvette dans la figure 3.17(a) illustrant l'alignement constant de l'axe de l'éprouvette avec celle de l'axe de traction au cours de la sollicitation.

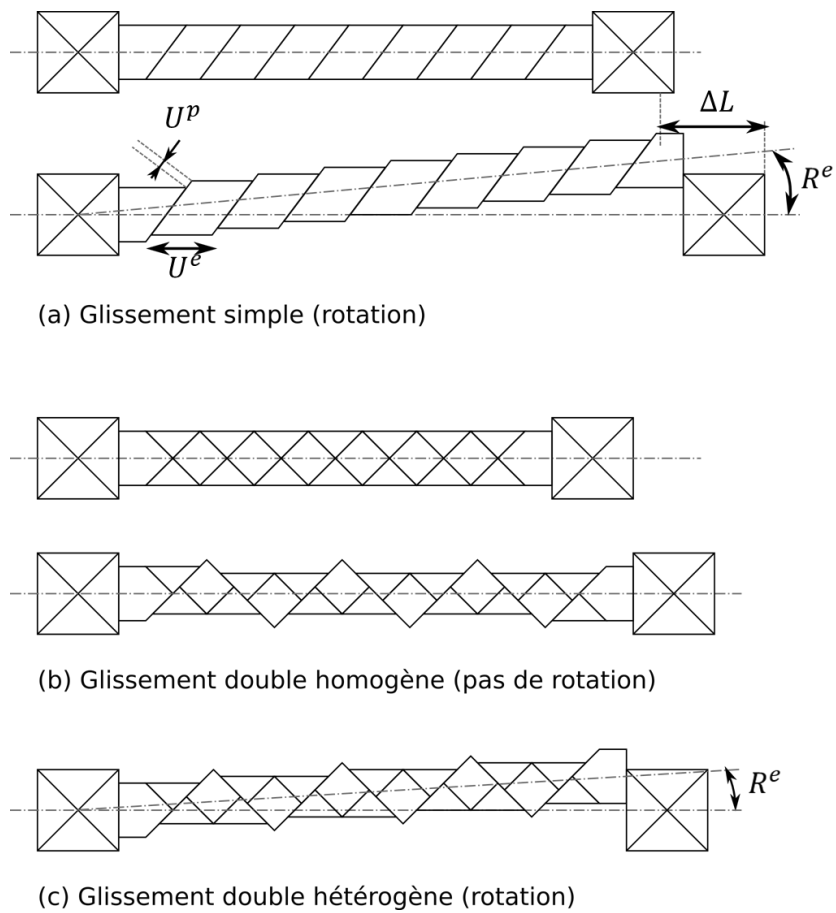


figure 3.17 : Illustration de la rotation d'une poutre 2D en traction lorsque (a) un seul système est actif, (b) deux systèmes sont actifs de manière homogène et (c) deux systèmes sont actifs mais ne manière non-homogène.

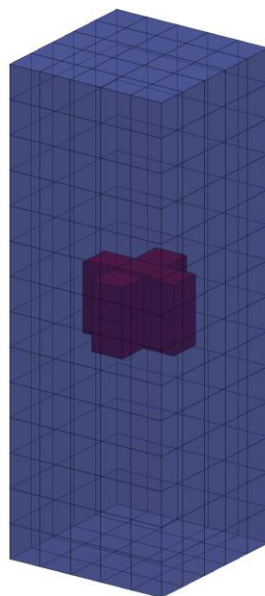


figure 3.18: Illustration des 10 éléments pris au centre de l'éprouvette EF pour mesurer la rotation moyenne après déformation.

Dans un cas de glissement plus complexe avec deux systèmes actifs, la figure 3.17(b) illustre que la rotation du réseau n'intervient pas lorsque le glissement est équivalent sur les deux systèmes actifs. En effet, dans ce cas le réseau cristallin n'a pas besoin de tourner pour garder l'axe de la poutre dans l'axe de la traction. Par contre, si le glissement sur ces deux systèmes n'est pas identique la configuration est à nouveau désaxée comme illustrée sur la figure 3.17(c).

La réalité est bien plus complexe en 3 dimensions avec les 24 systèmes de glissement de l' UO_2 et les conditions aux limites de l'essai de compression. C'est pourquoi la comparaison simulation-expérience de la rotation du réseau est utile lorsque les traces de glissement ne permettent pas d'identifier les systèmes actifs.

N'ayant pas de précision quant à la technique utilisée par les auteurs pour relever la rotation de réseau, nous avons choisi d'extraire la rotation moyenne issue des résultats de simulations sur 10 éléments situés au barycentre de l'éprouvette (voir figure 3.18). Les techniques du tracé des rotations dans une figure de pôle inverse sont données en Annexe B)

3.3.3. Résultats des simulations EF

3.3.3.1. Anisotropie viscoplastique avec les modes de glissement $\{100\}$ et $\{110\}$

Évolution de la contrainte au cours de la déformation

La figure 3.19 montre des courbes de contrainte-déformation issues des résultats de simulation EF, comparées aux résultats expérimentaux de Sawbridge et Sykes. Dans le tableau 3.5, on détaille l'activation des différents systèmes pour les orientations associées.

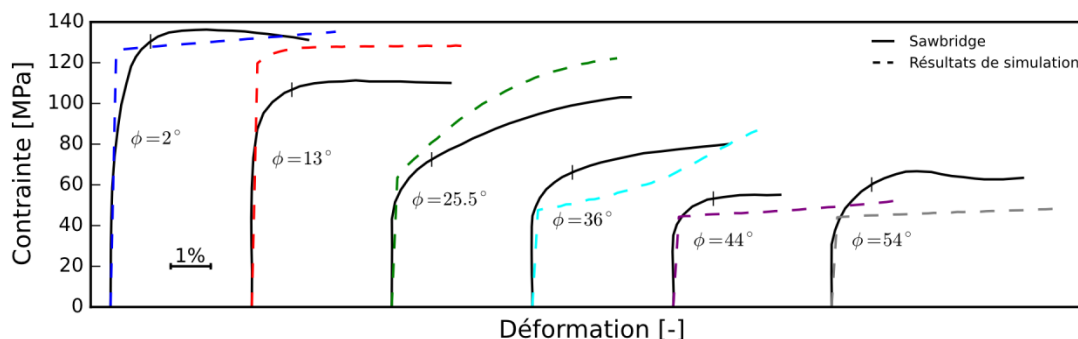


figure 3.19 : Résultats de simulation comparés aux mesures expérimentales [Sawbridge et Sykes (1971)] de contrainte en fonction de la déformation

tableau 3.5 : Observations expérimentales de traces de glissement [Sawbridge et Sykes (1971)] et activité des systèmes en simulation.

Orientation	Observation expérimentale	Systèmes actifs en simulation avec la proportion de cisaillement et les facteurs de Schmid
$\phi = 2^\circ$	2 systèmes du mode {110}	[011](0 $\bar{1}$ 1) : $\gamma/\gamma_{tot} \approx 25\%$; $f \approx 0,499$ [0 $\bar{1}$ 1](011) : $\gamma/\gamma_{tot} \approx 25\%$; $f \approx 0,499$ [101]($\bar{1}$ 01) : $\gamma/\gamma_{tot} \approx 25\%$; $f \approx 0,499$ [10 $\bar{1}$](101) : $\gamma/\gamma_{tot} \approx 25\%$; $f \approx 0,499$
$\phi = 13^\circ$	-	[$\bar{1}$ 10](001) : $\gamma/\gamma_{tot} \approx 38\%$; $f \approx 0,22$ 4 systèmes du mode {110} : $\gamma/\gamma_{tot} > 14\%$; $f \approx 0,42$
$\phi = 25,5^\circ$	1 système du mode {100}	[$\bar{1}$ 10](001) : $\gamma/\gamma_{tot} \approx 60\%$; $f \approx 0,39$ 4 systèmes du mode {110} : $\gamma/\gamma_{tot} \approx 8\%$; $f \approx 0,36$
$\phi = 36^\circ$	1 système du mode {100}	[$\bar{1}$ 10](001) : $\gamma/\gamma_{tot} \approx 83\%$; $f \approx 0,48$ 4 systèmes du mode {110} 4 autres systèmes du mode {100}
$\phi = 44^\circ$	1 système du mode {100}	[$\bar{1}$ 10](001) : $\gamma/\gamma_{tot} \approx 90\%$; $f \approx 0,5$ [10 $\bar{1}$](010) : $\gamma/\gamma_{tot} \approx 5\%$; $f \approx 0,42$ [011](100) : $\gamma/\gamma_{tot} \approx 5\%$; $f \approx 0,42$
$\phi = 54^\circ$	1 système du mode {100}	[$\bar{1}$ 10](001) : $\gamma/\gamma_{tot} \approx 38\%$; $f \approx 0,48$ [10 $\bar{1}$](010) : $\gamma/\gamma_{tot} \approx 31\%$; $f \approx 0,47$ [011](100) : $\gamma/\gamma_{tot} \approx 31\%$; $f \approx 0,47$
$\Omega = 0^\circ$	Glissement multiple sur les modes {100} et {111}	[101](010), [10 $\bar{1}$](010), [$\bar{1}$ 10](001), [110](001) : $\gamma/\gamma_{tot} \approx 25\%$; $f \approx 0,35$
Orientation intermédiaire de Ω	Traces de glissement sur les plans (001) et (111) qui sont des plans de glissement dévié pour un vecteur de glissement [101]	[$\bar{1}$ 10](001) : $\gamma/\gamma_{tot} \approx 36\%$; $f \approx 0,34$ [10 $\bar{1}$](010) : $\gamma/\gamma_{tot} \approx 29\%$; $f \approx 0,32$ [101](010) : $\gamma/\gamma_{tot} \approx 17\%$; $f \approx 0,28$ [110](001) : $\gamma/\gamma_{tot} \approx 24\%$; $f \approx 0,27$

L'allure des courbes de contrainte-déformation au-dessus de 1% sont qualitativement bien reproduites. Cependant, en dessous de 1% les simulations ne reproduisent pas correctement la tendance expérimentale probablement à cause d'un stade 0 comme le suggère Sawbridge et Sykes. Ce stade zéro participe peu à la déformation du cristal et nous n'avons pas trouvé de modélisations proposées pour ce stade dans la littérature. Sur ces mêmes courbes on constate que la dépendance de la contrainte à l'orientation cristalline, qui caractérise l'anisotropie viscoplastique, est en bon accord avec l'expérience. De plus, d'après la figure 3.19 et le tableau 3.5, la comparaison calcul-mesure des courbes de contrainte-déformation est satisfaisante lorsque l'un des modes {100} ou {110} est seul pour accommoder les déformations. C'est le cas pour les orientations $\phi = 2^\circ$ et $\phi = 44^\circ$ où les facteurs de Schmid sont quasi maximums respectivement pour le mode {110} et le mode {100}. L'orientation $\phi = 13^\circ$ est celle pour laquelle la simulation surestime le plus la contrainte. Dans ce cas, la simulation montre que la déformation est accommodée en grande partie par un système de mode {100} et 4

systèmes de mode $\{110\}$. Malheureusement, les auteurs n'ont donné aucune observation de traces de glissement pour cette orientation.

Notons également que pour les orientations $\phi = 25,5^\circ$ et $\phi = 36^\circ$ les courbes simulées montrent un durcissement comme pour l'expérience, alors qu'aucun terme d'écrouissage n'a été introduit dans le modèle. L'effet observé est purement géométrique et sera discuté dans la section 3.3.3.2. Finalement, la simulation sous-estime légèrement la contrainte pour l'orientation $\phi = 54^\circ$ alors que seul le mode $\{100\}$ est actif pour l'expérience comme pour la simulation.

Rotation du réseau cristallin après déformation

La figure 3.20 montre les résultats éléments finis de la rotation au centre du monocristal comparés aux mesures expérimentales de Sawbridge et Sykes. Pour les orientations entre $\phi = 25^\circ$ et $\phi = 47^\circ$, la rotation simulée est en accord avec l'expérience faisant tourner l'axe de compression dans le repère du cristal vers l'orientation $[011]$. Cette rotation est très certainement liée à la forte activation du système $[\bar{1}10](001)$ d'après la simulation et conformément à l'expérience (on se place dans le cas illustré en figure 3.17(a)).

Pour les orientations aux sommets de la FPI ($[001]$, $[\bar{1}11]$ et $[011]$), la rotation prévue par la simulation est négligeable, ce qui indique que dans ces configurations, le cisaillement est homogène sur des systèmes symétriques (comme illustré en figure 3.17(b)) alors que l'expérience montre qu'il y a rotation.

Pour les orientations proches de $[001]$, la rotation mesurée est probablement liée aux observations d'un ou deux systèmes actifs du mode $\{110\}$ engendrant un cisaillement asymétrique (ou hétérogène) alors que la simulation en montre 4 symétriques. Bien que les valeurs de contrainte calculées soient cohérentes avec l'expérience, le modèle ne peut pas prédire cette activation asymétrique.

Pour l'orientation proche de $[\bar{1}11]$, la différence calcul-mesure de la rotation est probablement dû à une activation asymétrique des systèmes $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle\{100\}$ dans l'expérience que la simulation ne peut pas recréer. En effet, la mesure met en évidence seulement le système $[\bar{1}10](001)$, montrant ainsi une rotation de CA vers $[001]$. Par contre la simulation prévoit trois systèmes du mode $\{100\}$ avec des activations fortes.

Finalement, pour l'orientation $[011]$, l'expérience montre l'activation des modes $\{100\}$ et $\{111\}$. Ce dernier mode n'étant pas pris en compte dans la simulation la rotation ne peut-être que différente si ce système contribue de façon significative à l'accommodation de la déformation. La même conclusion peut être donnée pour les orientations au centre de la FPI.

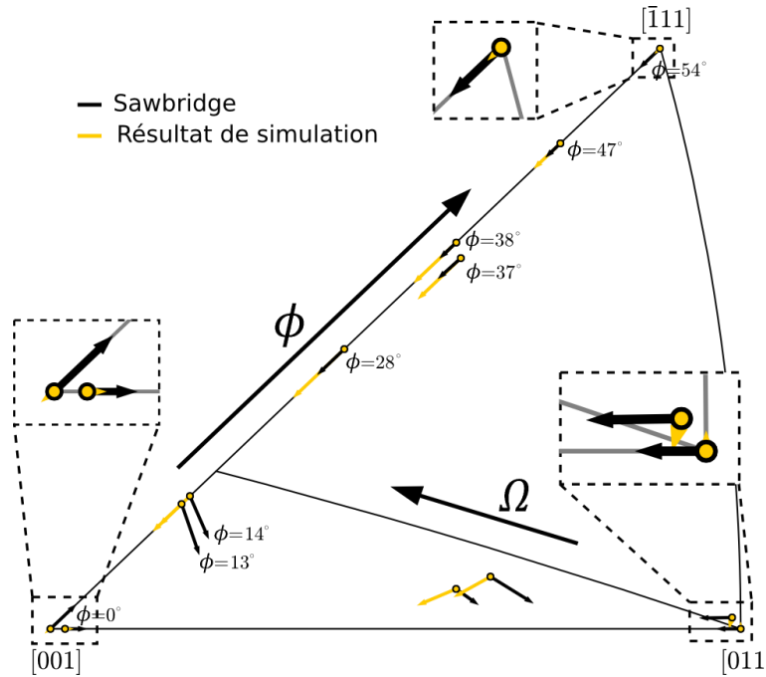


figure 3.20 : Comparaison de la rotation au centre du monocristal entre la simulation et les mesures de [Sawbridge et Sykes \(1971\)](#) après 2% de déformation

Enfin, pour les orientations $\phi = 13^\circ$ et $\phi = 14^\circ$, la simulation ne prédit pas correctement la rotation. Nous pouvons donc en conclure que l'activation des différents systèmes n'est pas bien prédite dans ce cas.

Anisotropie viscoplastique et contribution du cisaillement

Dans cette partie l'analyse de l'anisotropie viscoplastique à 2% de déformation est présentée avec une simulation basée sur la contribution du cisaillement des modes $\{100\}$ et $\{110\}$. Il apparaît que la simulation sous-estime légèrement la contrainte expérimentale de $\phi = 0^\circ$ jusqu'à 10° (voir figure 3.21(a)). Dans cette zone, la figure 3.21(b) montre que c'est le mode $\{110\}$ qui accommode à plus de 75% la déformation.

Entre $\phi = 10^\circ$ et $\phi = 40^\circ$, la contrainte est légèrement surestimée et la déformation est accommodée majoritairement par le mode $\{100\}$ au-delà de 20° . Le calcul de la contrainte d'écoulement proposée par [Sawbridge et Sykes \(1971\)](#) (section 3.3.1), suppose que la déformation peut être accommodée par le mode $\{100\}$ seul. Cependant, les résultats obtenus ici montrent que cette hypothèse est fausse. En effet, la simulation prédit la présence non négligeable des systèmes $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{110\}$. Si ces derniers n'étaient pas considérés dans le modèle la contrainte serait beaucoup plus élevée. Finalement, après 40° le mode $\{100\}$ est seul à accommoder la déformation et il apparaît que la contrainte est légèrement surestimée proche de $\phi = 54^\circ$.

Pour les orientations Ω , la contrainte simulée est assez différente des résultats expérimentaux. Pour $\phi < 25^\circ$, la contrainte est fortement sous-estimée avec une valeur presque deux fois plus faible que l'expérience. Dans cette zone, le calcul EF prévoit que

la déformation est accommodée par du glissement multiple sur les systèmes $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle\{100\}$. Ceci n'est pas en accord avec l'expérience où les systèmes $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle\{111\}$ semblent jouer un rôle non négligeable. Pour la même orientation d'autres auteurs observent du glissement multiple seulement sur des plans $\{100\}$ mais à des niveaux de déformations très faibles de l'ordre de 0,3% [Lefebvre (1976), Alamo et al. (1978)]. Toutefois, ils observent de légères déviations des traces de glissement sur des systèmes $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle\{111\}$. Il a été conclu par les auteurs que le glissement est initié dans le mode $\{100\}$ puis dévie de plus en plus sur les plans $\{111\}$ lorsque la déformation augmente.

Dans le domaine $\Omega \in [20;35]$, la contrainte simulée augmente fortement jusqu'à 130 MPa alors que les mesures suivent un plateau proche de 110 MPa. Pour ces orientations-ci, les traces de glissement ne suivent pas des plans cristallographiques mais le MRSSP alors que les simulations montrent majoritairement du cisaillement dans les modes $\{100\}$ et $\{110\}$.

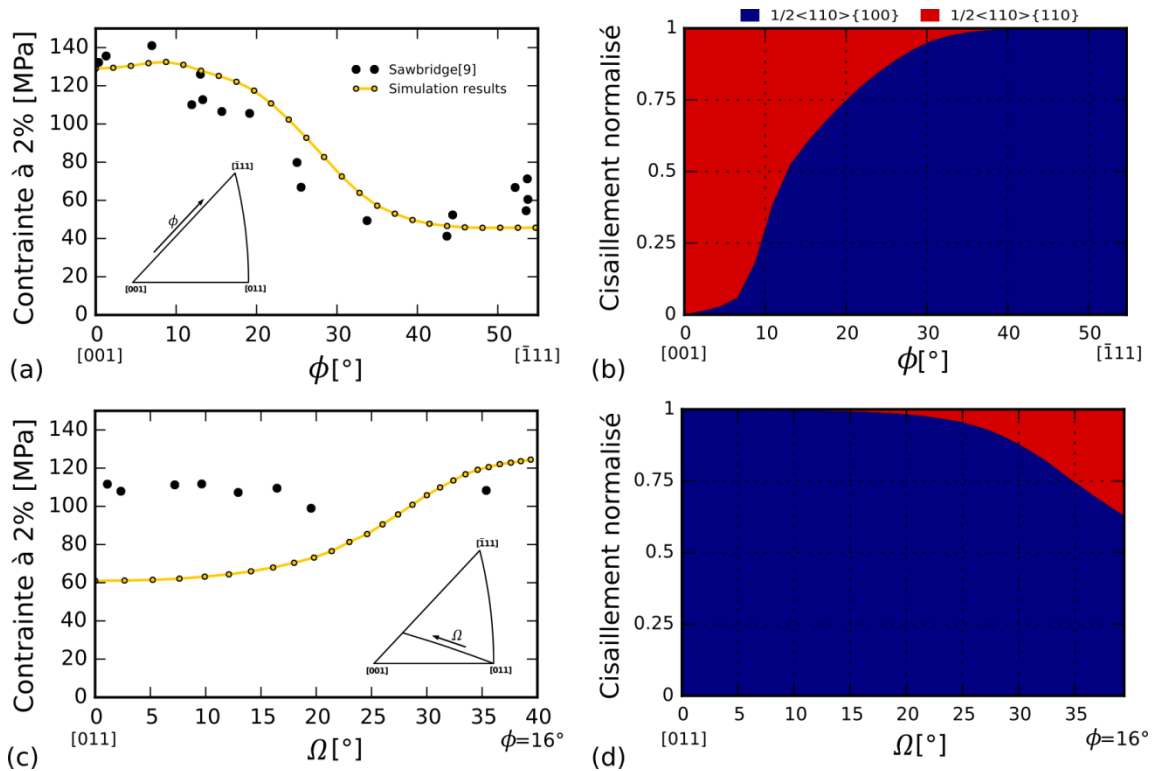


figure 3.21 : Comparaison de l'anisotropie viscoplastique à 2% de déformation entre la simulation EF et les résultats expérimentaux de Sawbridge et Sykes (1971). (a) et (c) représentent l'anisotropie viscoplastique en fonction respectivement de ϕ et Ω . (b) et (d) représentent la contribution du cisaillement en fonction respectivement de ϕ et Ω .

3.3.3.2. Durcissement et rotation

Les résultats expérimentaux mettent en évidence une augmentation de la contrainte au cours de la déformation pour les orientations $\phi = 25,5^\circ$ et $\phi = 36^\circ$ (voir figure 3.19). Ce durcissement est un effet purement géométrique lié à l'anisotropie viscoplastique, montrée sur la figure 3.21, et à la rotation du réseau montrée sur la figure 3.20. En effet,

au premier stade de la déformation le système $[\bar{1}10](001)$ est fortement actif or nous avons vu que cela a pour conséquence d'engendrer une rotation de CA vers l'axe $[001]$ du cristal (diminution de l'angle ϕ). D'un autre côté, plus l'angle ϕ diminue plus la contrainte est élevée pour $\phi \in [10^\circ; 40^\circ]$. Ceci explique bien le durcissement observé.

Pour $\phi = 25,5^\circ$ et $\phi = 36^\circ$ les courbes d'écrouissage simulées sont relativement différentes. Dans le premier cas la pente de la courbe d'écrouissage diminue au cours de la déformation, alors que pour $\phi = 36^\circ$ il semble y avoir deux stades avec une pente qui augmente au-delà de 3% de déformation. Dans les deux cas ces résultats peuvent s'expliquer par le phénomène géométrique décrit dans le paragraphe précédent en analysant l'anisotropie viscoplastique en fonction de ϕ sur la courbe de la figure 3.19. Pour $\phi = 36^\circ$, l'évolution du durcissement n'est pas conforme à celui de l'expérience. Nous n'avons pas identifié la raison mais nous soulignons la possible importance d'un stade 0 qui n'est pas reproduit ici.

3.3.3.3. Prise en compte des systèmes $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle\{111\}$ dans le modèle

Le modèle utilisé pour du glissement thermiquement activé sur les systèmes $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle\{100\}$ et $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle\{110\}$ (voir section 3.1) donne des résultats de simulation EF raisonnablement bons en comparaison des résultats expérimentaux de [Sawbridge et Sykes \(1971\)](#) dans la section 3.3.3.1. Cependant, dans trois domaines d'orientation étudiés, la simulation ne permet pas de prédire suffisamment bien les résultats expérimentaux :

- (i) surestimation de la contrainte dans la région de la FPI délimitée par $\phi \in [15^\circ; 40^\circ]$ et $\Omega > 25^\circ$
- (ii) sous-estimation de la contrainte pour un CA proche de $[\bar{1}11]$
- (iii) sous-estimation de la contrainte dans la région $\Omega < 25^\circ$ avec mauvaise prédiction du glissement.

Notons que plusieurs mécanismes permettraient potentiellement d'améliorer les résultats : les interactions de dislocations, le glissement dévié et/ou le glissement sur les systèmes $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle\{111\}$. Dans cette partie nous étudierons le dernier mécanisme évoqué : le glissement sur les systèmes $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle\{111\}$. En effet, la zone où l'écart entre la contrainte simulée et la contrainte expérimentale est le plus grand est celle pour $\Omega < 25^\circ$ (zone (iii)). Or, c'est l'endroit où l'expérience montre l'apparition du glissement sur $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle\{111\}$ autant que sur $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle\{100\}$. Malheureusement, l'activation des systèmes du mode $\{111\}$ n'ayant jamais été observée seule, nous ne nous pouvons pas identifier de façon fiable les paramètres les concernant afin de les intégrer au modèle.

Nous avons donc réalisé une étude paramétrique à 1600 K pour analyser l'impact de son activation. Ainsi, plusieurs tests d'activation du mode $\{111\}$ ont été réalisés. Au cours de cette étude, deux cas montrent l'importance des systèmes $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle\{111\}$ dans la restitution de l'anisotropie. Sur la base du modèle avec les modes de glissement $\{100\}$

et {110} présenté section 3.1 (que nous appellerons cas 1 – voir tableau 3.6), nous avons ajouté au modèle les systèmes de mode {111} avec deux cas d'activation (cas 2 et cas 3 dans le tableau 3.6).

- Le cas 2 considère une activation des systèmes $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{111\}$ aussi dure que celle des systèmes $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{110\}$ (en utilisant les mêmes valeurs de paramètres donnant des CRSS équivalente).
- Le cas 3 considère une activation intermédiaire de {111} par rapport à {100} et {110} avec une valeur de $\tau_0^{\{111\}} = 3,5$ MPa (les autres paramètres étant égaux à ceux du mode {110}). Notons que pour ce cas nous avons également forcé « artificiellement » la désactivation des systèmes de mode {100} en diminuant la densité de dislocation mobile à $\rho_m^{\{100\}} = 10^7 \text{ m}^{-2}$. Cette désactivation n'est pas réaliste mais utile pour activer le mode {111} dans la zone proche de [011] (zone (iii)).

Notons que nous avons également étudié le cas où l'activation du mode {111} est intermédiaire (équivalent du cas 3) sans désactivation du mode {100} appelé cas 4. Celui-ci n'est pas discuté dans ce chapitre mais est présenté en Annexe C.

Pour illustrer ces différents cas, nous avons tracé les CRSS en fonction de la température sur figure 3.22. Les courbes bleue et rouge sont les mêmes que sur la figure 3.10. Notons que dans le cas 2, la CRSS $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{111\}$ est confondu avec $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{110\}$. La courbe verte représente dans le cas 3 l'activation intermédiaire de $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{111\}$ et les croix noires représentent l'activation diminuée de $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{100\}$.

tableau 3.6 : Étude paramétrique de l'activation des systèmes de glissement $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{111\}$ dans le modèle.

	Modèles							
	Cas 1		Cas 2			Cas 3		
Activation des modes de glissement	{100} mou + {110} dur		{100} mou + {110} dur + {111} aussi dur que {110}			{100} légèrement durcis + {111} intermédiaire + {110} dur		
Paramètres du modèle associé								
Modes	{100}	{110}	{100}	{110}	{111}	{100}	{110}	{111}
$\rho_m^s(\text{m}^{-2})$	6,2.10 ¹²	9,2.10 ¹¹	6,2.10 ¹²	9,2.10 ¹¹	9,2.10 ¹¹	1.10 ⁷	9,2.10 ¹¹	9,2.10 ¹¹
ΔH_0^i (eV)	5,71	5,22	5,71	5,22	5,22	5,71	5,22	5,22
τ_0^i (MPa)	1,35	4,78	1,35	4,78	4,78	1,35	4,78	3,5

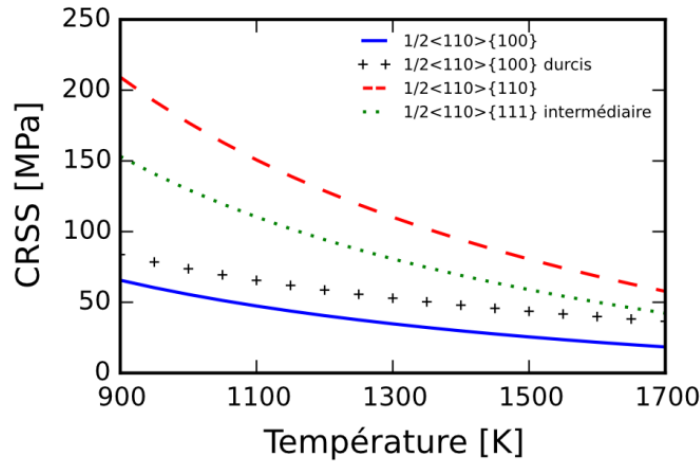


figure 3.22 : Illustration de l'activation des différents modes pour l'étude paramétrique de $\{111\}$ avec les courbes de CRSS en fonction de la température. La courbe bleue représente l'activation des systèmes $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{100\}$ pour les cas 1 et 2. La courbe rouge représente l'activation de $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{110\}$ dans tous les cas ainsi que l'activation de $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{111\}$ dans le cas 2. Les courbes noires et vertes représentent respectivement l'activation de $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{100\}$ et de $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{111\}$ dans le cas 3.

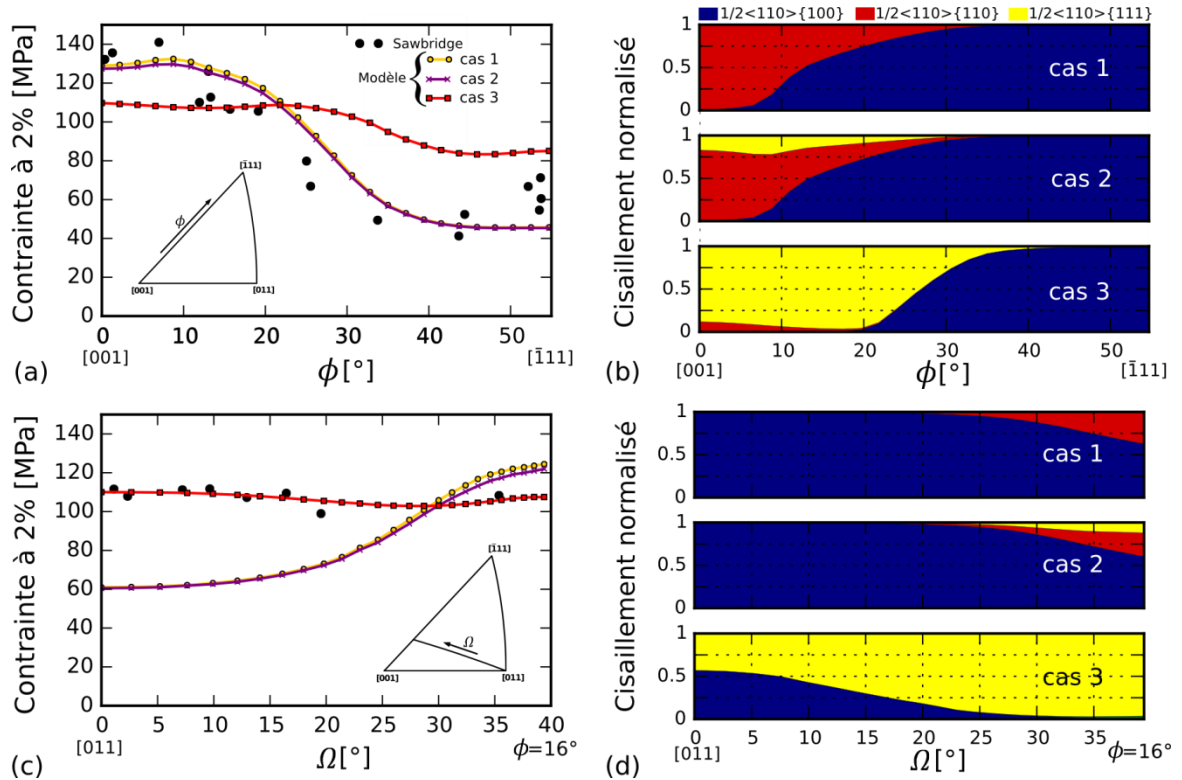


figure 3.23 : Comparaison de l'anisotropie viscoplastique à 2% de déformation entre la simulation EF avec différentes activations du mode $\{111\}$ et les résultats expérimentaux de [Sawbridge et Sykes \(1971\)](#). (a) et (c) représentent l'anisotropie viscoplastique en fonction respectivement de ϕ et Ω . (b) et (d) représentent la contribution du cisaillement en fonction respectivement de ϕ et Ω .

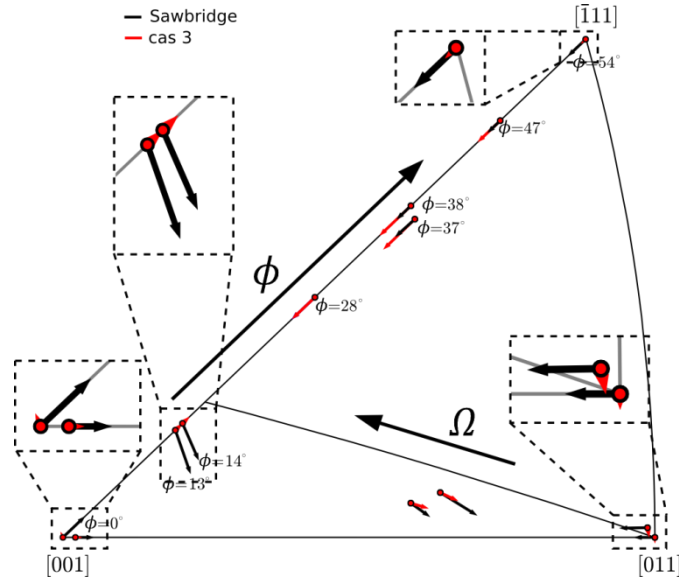


figure 3.24 : Comparaison de la rotation au centre du monocristal entre la simulation et l'expérience [Sawbridge et Sykes (1971)] après 2% de déformation avec l'intégration du mode $\{111\}$ dans le modèle.

Les résultats EF avec le cas 2 (voir figure 3.23) ne montrent pas de changement significatif de la contrainte en fonction de ϕ et Ω . Cependant on peut observer sur la figure 3.23(b) que le mode $\{111\}$ participe légèrement à l'accommodation de la déformation proche de $[001]$ où il a été observé expérimentalement de légères traces de glissement sur ce mode. Ce cas montre qu'il peut y avoir présence des modes $\{110\}$ et $\{111\}$ proche de ϕ en cohérence avec l'expérience.

Concernant le cas 3, les résultats EF montrent une nette amélioration de la prédiction de la contrainte pour les orientations Ω (figure 3.23(c)). La proportion du cisaillement du mode $\{111\}$ (figure 3.23(d)) semble également plus cohérente avec l'expérience. De plus, au centre de la FPI, la rotation du réseau simulée est en très bon accord avec l'expérience (voir figure 3.24). Ce résultat confirme bien la nécessité de prendre en compte également les systèmes du mode $\{111\}$ dans la modélisation. Il faut noter cependant que le durcissement « artificiel » de $\{100\}$ est nécessaire pour l'activation significative de $\{111\}$.

En revanche, le cas 3 conduit à une dégradation des résultats pour les orientations ϕ . En effet, on observe la disparition des systèmes $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{110\}$ et une forte diminution de la contrainte pour CA proche de $[001]$. On observe également, l'augmentation de la contrainte pour des valeurs fortes de ϕ dû à la désactivation de $\{100\}$. Par conséquent, l'activation de $\{111\}$ semble jouer un rôle important mais la façon dont ce mode s'active reste incompris.

3.3.4. Discussions et analyses

Dans la section précédente, nous avons étudié la prédiction de l'anisotropie viscoplastique de l'UO₂ par rapport à des essais expérimentaux à 1600 K [Sawbridge et Sykes (1971)] en utilisant un modèle décrit en section 3.1 dont les paramètres ont été calibrés en section 3.2. Les résultats obtenus montrent une bonne cohérence avec l'expérience. Cependant, certains aspects ne sont pas suffisamment bien prédits pour pouvoir restituer de manière précise l'anisotropie viscoplastique du monocristal d'UO₂. Ici, nous discuterons les différentes causes de cet écart à l'anisotropie expérimentale.

3.3.4.1. Effet de la loi de glissement sur l'interprétation des expériences

Avant de parler des mécanismes liés aux dislocations, revenons sur la formulation du modèle présenté au paragraphe 3.1.2. L'équation (3.19) reste une loi empirique pour la prise en compte de la dépendance en contrainte et température, et pour vérifier que cette formulation n'est pas à l'origine des différences obtenues lors de la prédiction de l'anisotropie viscoplastique nous allons reconduire l'analyse avec une loi à base physique. Pour cela nous utiliserons un modèle à double-décrochements présenté au chapitre 2. Ne connaissant pas l'ensemble des valeurs du pré-facteur de l'équation, nous avons simplifié le modèle de la manière suivante :

$$\dot{\gamma}^s = \rho_m^s v_D b^2 \exp \left(-\frac{\Delta H_0^i}{k_b T} \left(1 - \left(\frac{\tau^s}{\tau_p^i} \right)^p \right)^q \right) \quad (3.28)$$

Pour pouvoir effectuer la comparaison, nous avons fait en sorte que les CRSS pour les modes {100} et {110} en fonction de la température soient très proches de celles obtenues en section 3.2.3 (voir figure 3.25). Pour cela nous avons utilisé la même méthode que celle présentée en section 3.2.1 en inversant cette fois l'équation (2.11). Les paramètres de la loi sont donnés dans le tableau 3.7.

tableau 3.7 : Paramètres du modèle décrit en équation (3.28) pour les systèmes de glissement $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle\{100\}$ et $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle\{110\}$ issus de l'ajustement de CRSS en fonction de la température. Les valeurs entre parenthèses sont dues à un ajustement des contraintes en $\phi=0^\circ$ et $\phi=54^\circ$.

	$\frac{1}{2}\langle 110 \rangle\{100\}$	$\frac{1}{2}\langle 110 \rangle\{110\}$
$\rho_m^s (\text{m}^{-2})$	$10^{11} (5,4.10^{10})$	$10^{11} (2,2.10^{10})$
$\Delta H_0^i (\text{eV})$	4,51	5,78
$\tau_p^i (\text{GPa})$	0,17	0,86
p	0,5	0,5
q	1	1,95

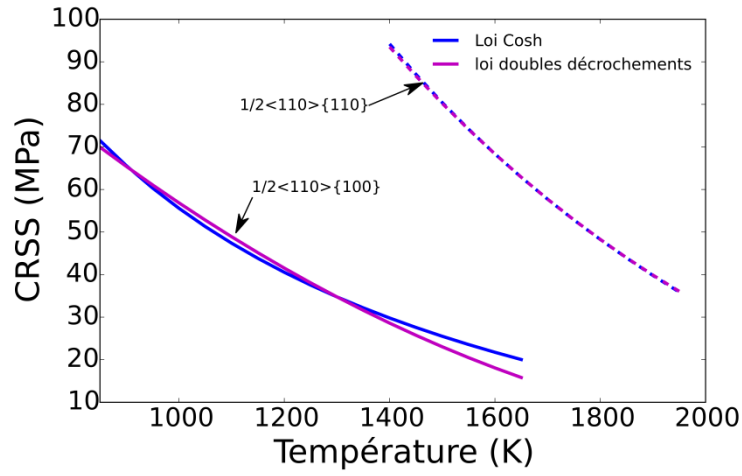


figure 3.25 : CRSS en fonction de la température – Comparaison entre le modèle en double-décrochements (en rouge) et le modèle cosinus hyperbolique (en bleu)

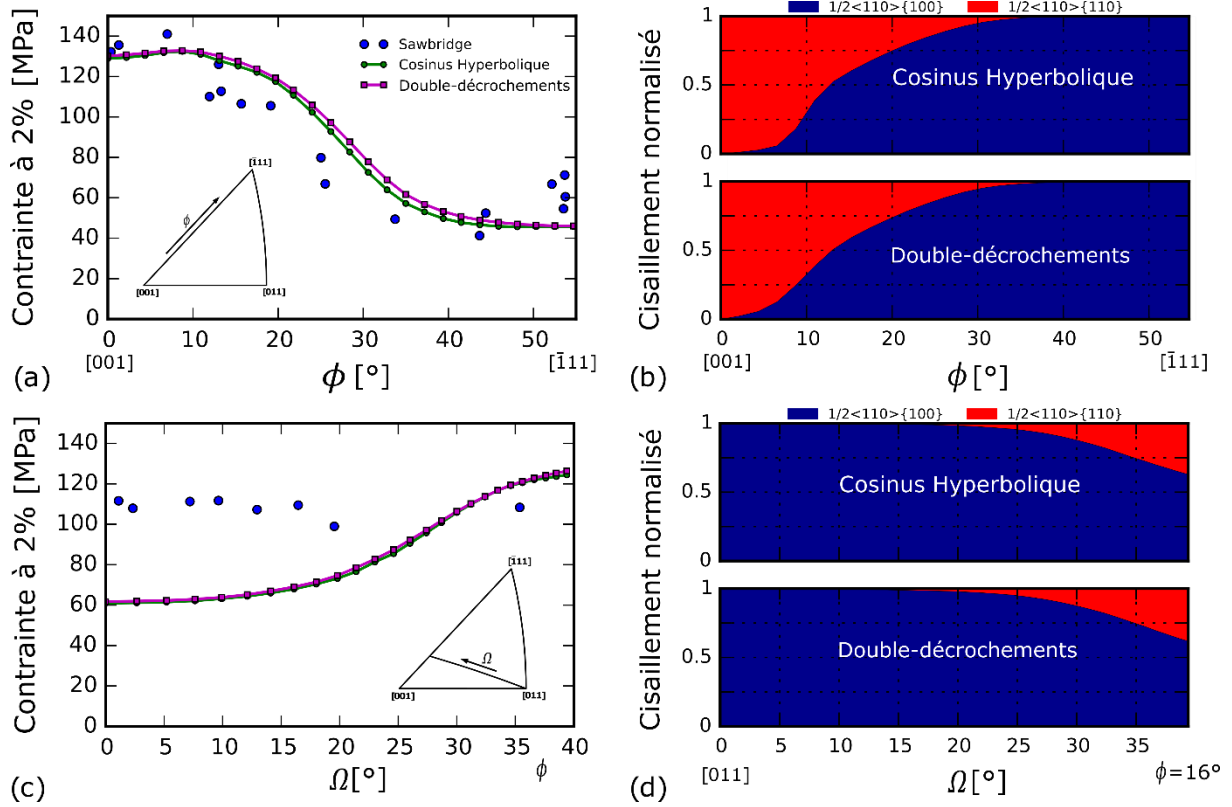


figure 3.26 : Contrainte à 2% et proportion du cisaillement pour les orientations cristallines ϕ et Ω – Comparaison entre un modèle à double-décrochements et le modèle utilisant un cosinus hyperbolique.

Les contraintes données par le modèle double-décrochements, dont les paramètres sont donnés en tableau 3.7, sont plus faibles que celles du modèle en cosinus hyperbolique. C'est pourquoi nous avons ajusté les valeurs de ρ_m^s (nouvelles valeurs données entre parenthèses dans le tableau 3.7) pour que les contraintes coïncident à 1600 K avec celle du modèle en cosinus hyperbolique. Ainsi, la comparaison des résultats des deux modèles (figure 3.26) montre la même anisotropie viscoplastique et la même activation des modes de glissement. Il peut donc être conclu que le modèle n'est pas en cause.

Notons que les simulations utilisant ce modèle convergent plus difficilement que celles utilisant la loi en cosinus hyperbolique. En effet, la différence de contrainte observée pour des valeurs de ϕ intermédiaire provient d'une modification de l'implémentation du modèle afin qu'il puisse converger plus facilement. Ces problèmes de convergence apparaissent lorsque le rapport τ^s/τ_p est très petit. Nous avons donc été obligés de mettre un seuil de 10^{-4} à ce rapport. Cela a pour conséquence d'empêcher les systèmes faiblement actifs auparavant de s'activer engendrant une légère surestimation de la contrainte.

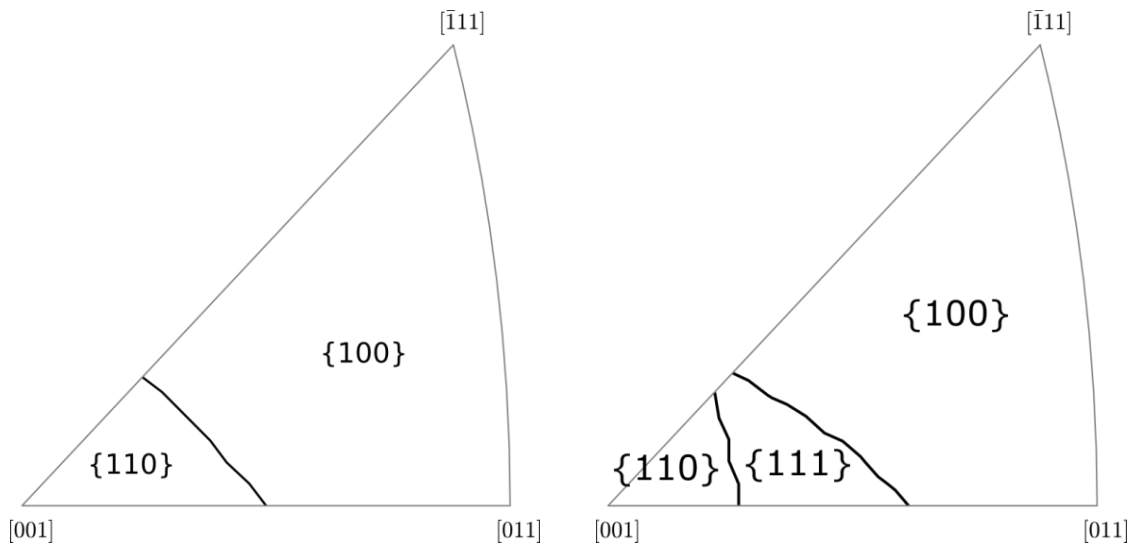
3.3.4.2. Optimisation des paramètres

Dans notre analyse, nous n'avons pas jugé nécessaire de faire une optimisation des paramètres du modèle en activant les 3 modes de glissement simultanément. Bien que cela ait été possible, nous savions que cela n'aurait pas amélioré les comparaisons calculs mesure pour décrire l'anisotropie observée dans les essais de [Sawbridge et Sykes \(1971\)](#). En effet, la loi de Schmid, que doit respecter le modèle, est trop restrictive pour permettre d'ajuster l'anisotropie tout en respectant l'ordre d'activation des différents modes de glissement. La configuration des facteurs de Schmid ne permet pas d'avoir une activation conséquente du mode {111} sans faire disparaître le mode {110} qui est d'importance capitale (voir figure 3.27(c)). De même, il n'est pas possible d'après le critère de Schmid de faire intervenir de manière significative le mode {111} proche de CA = [011] sans accroître le seuil d'activation du mode {100}.

3.3.4.3. Autres mécanismes impliqués

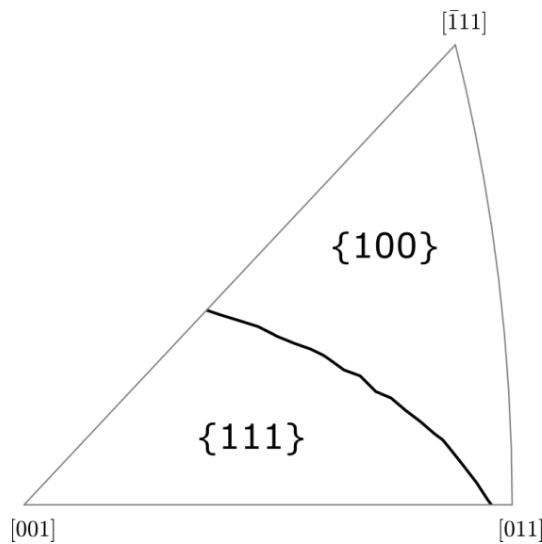
Les autres pistes étant écartées, la plus fiable à investiguer est celle de l'implication d'autres mécanismes dans le processus de glissement des dislocations. Afin d'améliorer la compréhension du comportement viscoplastique de l'UO₂, il est nécessaire d'améliorer la prédiction de l'activation des différents systèmes de glissement et ainsi la prédiction de l'anisotropie viscoplastique. La figure 3.28 résume les résultats obtenus en section 3.3.3. Les deux IPF montrent les résultats avec un modèle considérant deux activations différentes des modes {111} et {100}. Ces deux études font apparaître que changer les seuils d'activation des différents modes de glissement peut mener à des résultats complémentaires. Par conséquent, le modèle pourrait être amélioré avec des

seuils d'activation des systèmes dépendants de l'orientation cristalline. Cependant, il n'est pas aisé d'identifier l'origine de cette dépendance. Nous avons émis l'hypothèse qu'elle pouvait être dû à d'éventuelles interactions entre systèmes de glissement (interaction des dislocations, glissement dévié/combinaison, ...) ou à un non-respect de la loi de Schmid.



(a) Cisaillement cas 1

(b) Cisaillement cas 2



(c) Cisaillement avec les trois modes et activation de {111} intermédiaire

figure 3.27 : Zone d'activation des différents modes de glissement dans la FPI - (a) cisaillement des modes {100} et {110} (cas 1) - (b) cisaillement avec le mode {111} aussi dur que {110} (cas 2)- (c) cisaillement avec le mode {111} intermédiaire (pas de durcissement de {100})

D'après la littérature sur l' UO_2 , les mécanismes qui peuvent être présents en plus du glissement simple sont (i) la montée de dislocation, (ii) les interactions de dislocations et (iii) le glissement dévié. La montée est très présente mais d'après [Guerin \(1975\)](#) ce mécanisme n'est pas prédominant pour des températures plus faibles que 1400°C .

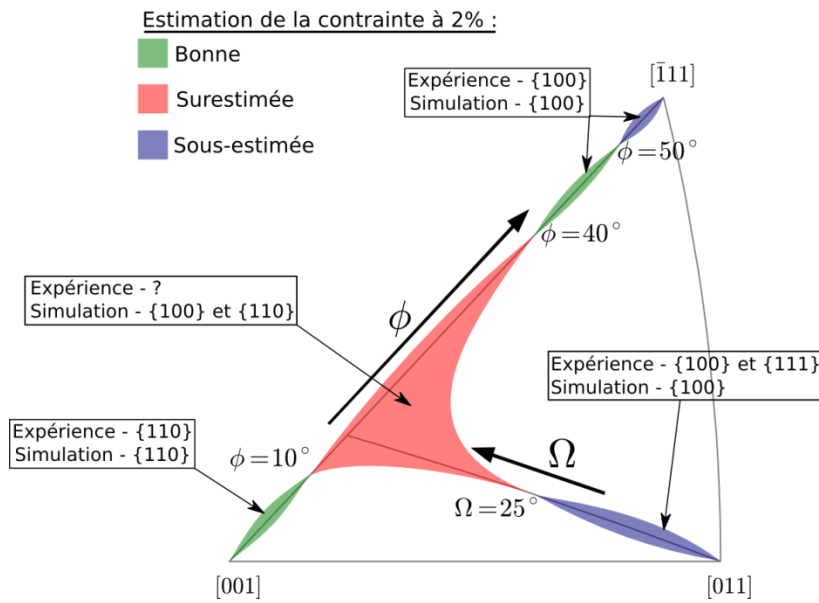
Le glissement dévié est lui beaucoup cité dans la littérature expérimentale [[Sawbridge et Sykes \(1971\)](#), [Yust et McHargue \(1969\)](#), [Keller et al. \(1988b\)](#)]. Néanmoins, sa modélisation en plasticité cristalline n'est pas aisée surtout dans un régime thermiquement activé. De plus, si ce mécanisme est prépondérant, il est plutôt connu pour ses effets adoucissants. En effet, lorsqu'une dislocation rencontre un obstacle il peut être énergétiquement favorable que les dislocations vis dévient plutôt que la dislocation franchisse l'obstacle. Dans notre cas, proche des orientations $[011]$, la contrainte simulée est plus faible que la contrainte mesurée. Si le mécanisme manquant est du glissement dévié, il est rare qu'il soit durcissant comme il devrait l'être ici. Il existe toutefois des exemples contraires dans la littérature [[Choi et al. \(2007a\)](#), [Choi et al. \(2007b\)](#), [Madec et al. \(2013\)](#)].

D'un autre côté, bien que les interactions des dislocations soient moins favorables dans un régime thermiquement activé, elles permettent cet effet durcissant et également la variation de l'activation des systèmes [[Madec et al. \(2003\)](#), [Dequiedt et al. \(2015\)](#)]. De plus, il a été évoqué dans la littérature [[Sawbridge et Sykes \(1971\)](#), [Keller et al. \(1988b\)](#)].

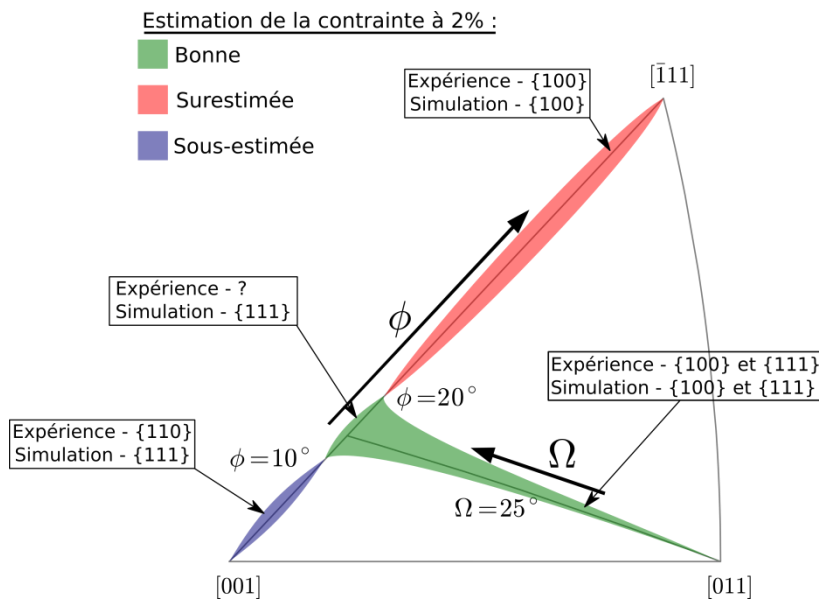
3.4. Conclusions

Dans ce chapitre, l'anisotropie viscoplastique de l' UO_2 a été étudiée en utilisant, dans un premier temps, une loi de comportement ne comprenant que les systèmes $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle\{100\}$ et $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle\{110\}$ en section 3.3.3.1. Les résultats obtenus montrent une bonne approximation de la contrainte et du cisaillement pour les orientations ϕ mais pas pour les orientations Ω (voir figure 3.28(a) qui résume ces résultats). Ensuite, une étude paramétrique de l'activation des systèmes de type $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle\{111\}$ a été réalisée dans la section 3.3.3.3. Cette dernière a permis d'identifier que leur activation permet d'améliorer la prédiction de la contrainte et des cisaillements pour les orientations Ω mais au détriment des bons résultats obtenus précédemment pour les orientations ϕ (voir résumé figure 3.28(b)). Ces résultats montrent que la loi de Schmid seule ne permet pas de décrire de façon complètement satisfaisante l'activation des systèmes en fonction de l'orientation cristalline.

De plus, la complémentarité des résultats avec différentes activations de systèmes de glissement, résumés sur la figure 3.28, met en évidence que les seuils d'activation des systèmes change en fonction de l'orientation cristalline et qu'en plus les systèmes $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle\{111\}$ sont primordiaux. C'est pourquoi, d'autres mécanismes doivent être considérés dans le modèle. Ces mécanismes pourraient être de la montée, des dislocations, du glissement dévié/combiné, de l'interaction entre dislocations ou encore



(a) cas 2 ($\approx$ cas 1)



(b) cas 3

figure 3.28 : Résumé des résultats de la simulation EF de l'anisotropie viscoplastique comparés aux résultats expérimentaux de [Sawbridge et Sykes \(1971\)](#) – (a) cas 1 et 2 et (b) cas 3 (voir la description des différents cas dans le tableau 3.6).

des effets non-Schmid. Le glissement dévié/combiné et les interactions entre dislocations semblent être les pistes les plus intéressantes en dessous de 1400°C mais au-dessus, il est possible que la diffusion contribue avec les mécanismes de montée.

De manière générale, il peut être souligné que le modèle décrit bien la réalité des mécanismes. En effet, il permet de reproduire le durcissement apparent conséquence de l'anisotropie viscoplastique et de la rotation du cristal pour certaines orientations. Cela est effectivement possible du fait d'une bonne estimation de la rotation du réseau cristallin au cours de la déformation comme nous l'avons exposé en section 3.3.3.2. De plus cette rotation est liée à l'activation des différents systèmes de glissement qui est également bien restituée. Il est vrai que certains points restent à approfondir pour pouvoir réduire les écarts calcul-mesure sur les monocristaux, mais il est aujourd'hui tout à fait possible d'utiliser le modèle pour l'analyse du comportement de l'UO₂.

4. Interactions des dislocations

L'objectif de ce chapitre est à la fois d'extraire la force des interactions entre systèmes de glissement et d'évaluer leur rôle dans la réponse mécanique de l' UO_2 . On calcule les interactions dans le régime athermique ce qui permet d'extraire leur force intrinsèque indépendamment de considérations sur leur mobilité qui reste encore assez mal connue. On estime ensuite leur effet dans un régime où l'activation thermique contribue encore significativement à la réponse mécanique faute de disposer de résultats expérimentaux dans un autre régime. Le modèle fourni alors une borne supérieure de l'impact de l'écroutissage et permet de majorer son effet.

Sommaire

4.1. Motivation	82
4.2. Effet durcissant des interactions entre dislocations	84
4.2.1. Mécanisme de multiplication de Frank-Read	84
4.2.2. Modèle de stockage-restauration	85
4.2.3. Formation de jonction	88
4.2.4. Approximation isotrope de l'anisotropie élastique	90
4.2.5. Matrice d'interaction de l' UO_2	93
4.3. Dynamique des dislocations	96
4.3.1. Discrétisation de l'espace	96
4.3.2. Discrétisation des lignes de dislocation	97
4.3.3. Mobilité des dislocations	98
4.3.4. Calcul des interactions	98
4.4. Interactions des dislocations à l'aide de la DD	100
4.4.1. Cartographie des réactions	100
4.4.2. Calcul des coefficients	107
4.4.3. Conclusions	115
4.5. Effet de l'interaction des dislocations sur l'écroutissage et l'activation des systèmes de glissement dans l'UO_2	117
4.5.1. Intégration dans le modèle	117
4.5.2. Simulations EF avec écroutissage	121
4.5.3. Conclusions et discussions	134
4.6. Conclusions	135

4.1. Motivation

Nous avons introduit dans le chapitre 3 un modèle de plasticité cristalline basé sur le glissement des dislocations dans l'UO₂. Dans ce type de modèle se pose naturellement la question des interactions entre systèmes de glissement et donc entre dislocations. Il est alors préférable d'adopter une variable interne plus caractéristique de la microstructure que le glissement, et d'opter pour la densité de dislocations. En effet, les interactions entre dislocations gouvernent l'écrouissage et l'on peut utiliser le modèle de la forêt pour réaliser la transition d'échelle (équation (4.1)) des dislocations à l'écrouissage [Taylor (1934), Saada (1960)]. Ce modèle relie la contrainte d'écoulement τ_f à la densité de dislocations ρ_f :

$$\tau_f = \alpha \mu b \sqrt{\rho_f} \quad (4.1)$$

avec μ le module de cisaillement du matériau et b la norme du vecteur de Burgers.

Le modèle de la forêt est valable pour les métaux cubiques à faces centrées (CFC) ou plus généralement quand l'effet de la contrainte de Peierls est faible. Le paramètre de couplage du modèle est le coefficient α qui donne la contrainte moyenne sous la résistance des jonctions. Les jonctions, créées par fusion de deux dislocations en une seule lorsqu'elles interagissent, entravent leur glissement. On peut obtenir α à l'aide de simulations de la Dynamique des Dislocations (DD) [Madec et al. (2002a)] qui donnent des résultats en bon accord avec l'expérience [Basinski et Basinski (1979)].

Bien que cette loi en racine carrée de la densité de dislocations soit exclusivement utilisable dans le régime athermique (voir section 0 page 27), elle est assez couramment utilisée dans le régime thermiquement activé proche de la température de transition (T_a) pour les cubiques centrés (CC) [Hoc et al. (2003)] et pour les hexagonaux (HCP) [Knezevic et al. (2013)]. Pour ces derniers, les systèmes du plan de base présentent une faible contrainte de Peierls effective comme les matériaux CFC tandis que celle des systèmes pyramidaux est dix fois plus forte. Dans ce cas, proche de T_a , une loi de comportement athermique intégrant le modèle de la forêt est utilisée. Pour traduire des effets résiduels de l'activation thermique dans le modèle, une contrainte, qui dépend de la température, est ajoutée à l'équation du modèle de la forêt. Dès que cette contrainte n'est pas négligeable devant la contribution de la contrainte de la forêt, utiliser le modèle en question constitue une approximation assez forte.

En effet, l'écrouissage résulte des interactions entre dislocations, mais sa nature est différente suivant le régime considéré et la forme même de la loi d'échelle peut être modifiée [Rauch (1994), Tang et al. (1999)]. Pour autant, comme déjà indiqué, la forme en racine carrée est souvent utilisée hors de son strict domaine de validité (régime athermique) en raison de sa simplicité et si l'approche pour le matériau considéré reste

très largement phénoménologique. Dans ce cas, le modèle est au moins partiellement ajusté sur l'expérience. Il faut alors veiller à ne pas trop s'écarter de la zone ayant servi à l'ajustement, sa capacité prédictive s'altère rapidement et d'autant plus vite que la contribution de l'activation thermique devient importante.

Dans le cadre de notre étude on cherche à incorporer des paramètres dont l'origine physique est clairement établie et à les calibrer de la façon la plus précise possible. Mais d'un autre côté en l'absence de certitude absolue concernant la mobilité des dislocations et avec la quasi absence d'informations concernant le glissement dans le cas des systèmes de mode {111}, il est malaisé voire impossible de construire un modèle d'écrouissage matriciel capable d'assurer la transition entre les différents régimes. Ce type de modèle reste encore un sujet d'étude pour des matériaux plus documentés comme la ferrite [Monnet et al. (2013)]. Ainsi, nous gardons la forme d'écrouissage la plus courante et simple possible afin d'essayer de calibrer les paramètres associés par DD quand cela est possible. Le modèle sera ensuite confronté aux résultats expérimentaux disponibles ce qui permettra d'évaluer a minima l'impact de l'approximation faite sur l'écrouissage. En effet, les données expérimentales sur monocristaux à 1600 K se situent dans le régime thermiquement activé cependant les systèmes $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle\{100\}$ sont proches de la température athermique de 1750 K. Notons que nous attachons une attention particulière à l'activation des différents systèmes qui, comme nous l'avons vu précédemment, est difficile à restituer parfaitement sur la base d'un simple modèle de glissement (voir chapitre 3).

Des données expérimentales à plus hautes températures sont disponibles pour des polycristaux. L'écrouissage est alors très proche de celui du régime athermique (en tout cas pour les systèmes $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle\{100\}$), tandis que la présence des joints de grain et les accumulations de dislocations induites, renforcent l'importance de l'effet de la densité de dislocations. Concernant l' UO_2 , Sauter [Sauter (2001), Sauter et Leclercq (2003)] puis Pacull (2011) furent les premiers à intégrer les interactions des dislocations de plasticité dans des modèles cristallins appliqués aux polycristaux avec un couplage entre dislocations mobiles et obstacles. Leurs formulations visaient à restituer les pics de compression observés lors de compression sur pastille en ajustant les paramètres du modèle afin de décrire ce qu'ils pensaient être des avalanches de dislocations. Pour cela, ils ont ajusté le modèle pour qu'il y ait une augmentation de densité de dislocations mobile en début d'essais de compression. Par la suite, Soulacroix [Soulacroix (2014), Soulacroix et al. (2014)] a montré que ces pics de compression n'étaient pas liés aux avalanches de dislocations mais à un blocage des dislocations par migration de défauts ponctuels. D'autre part, il intégra ces interactions de dislocations en utilisant des coefficients d'interaction issus du cuivre, cependant son étude ne lui permis pas d'aller jusqu'à la description de l'effet Hall-Petch dans les polycristaux.

Notre étude est la première à porter sur l'effet des interactions entre dislocations à l'échelle du grain/monocristal d' UO_2 en identifiant via une approche multi-échelle la

force de ces interactions. Pour cela nous présentons dans un premier temps, ce qu'induisent les interactions entre dislocations en matière de durcissement. Nous introduisons, dans un deuxième temps, la méthode de simulation de la DD qui est utilisée pour calculer les coefficients de la matrice d'interaction comme cela est détaillé dans la troisième partie. En dernier lieu, ces coefficients sont intégrés dans le modèle de plasticité cristalline pour identifier leurs effets sur la réponse mécanique des monocristaux.

4.2. Effet durcissant des interactions entre dislocations

L'augmentation de la contrainte en cours de déformation résulte de l'augmentation de la densité de dislocations pendant la sollicitation et de la contrainte nécessaire pour que les dislocations franchissent les obstacles que constituent d'autres dislocations afin de produire un incrément supplémentaire de déformation.

L'augmentation de la densité de dislocations suppose l'existence d'un mécanisme capable d'assurer leur multiplication et d'un autre mécanisme capable d'assurer leur stockage. Nous verrons que le stockage est intimement lié aux interactions entre dislocations. Nous donnons un exemple de mécanisme de multiplication puis nous présenterons le modèle de stockage restauration couramment utilisé dès que l'on manipule des densités de dislocations pour décrire l'écrouissage.

4.2.1. Mécanisme de multiplication de Frank-Read

Lorsqu'une dislocation de longueur L est épinglée à ses extrémités (voir figure 4.1(a)), il faut une contrainte de cisaillement critique τ_c inversement proportionnelle à L pour que la ligne puisse se courber jusqu'à devenir instable et émettre des boucles :

$$\tau_c \propto \frac{\mu b}{R_c} \propto \frac{2\mu b}{L} \quad (4.2)$$

Notons que plus la distance L est petite plus la contrainte de cisaillement critique τ_c pour vaincre la tension de ligne[§] résultant de cet ancrage, est grande. Une fois cette contrainte dépassée, la dislocation évolue et forme une boucle tout en restituant le segment initial (voir figure 4.1(b)) et participe de ce fait à la multiplication des dislocations.

[§] Cette tension de ligne dérive de l'énergie élastique de la dislocation $E \propto \mu b^2 l$ avec l la longueur de la dislocation.

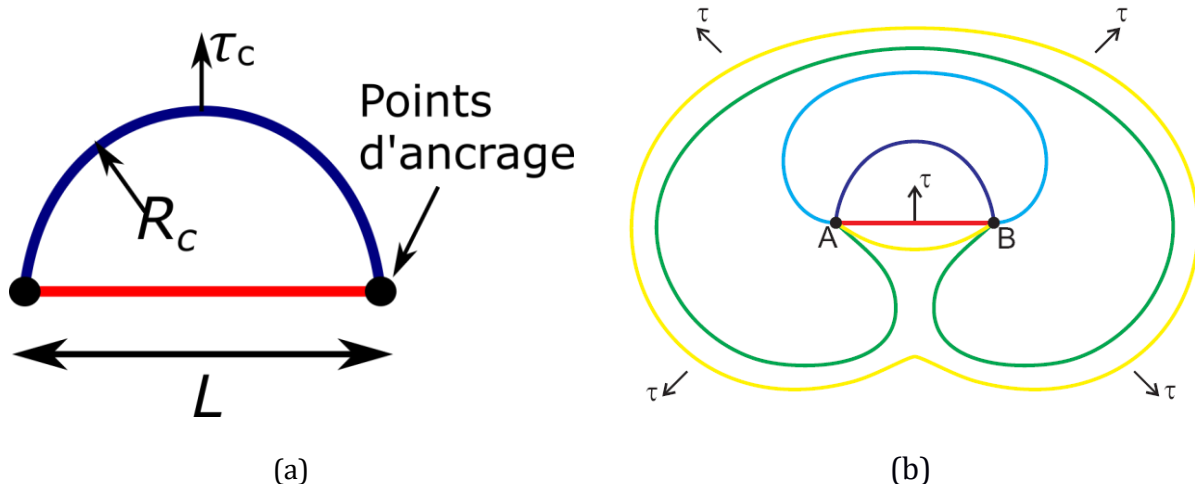


figure 4.1 : Schéma d'une source de Frank-Read. (a) Le segment de dislocation (rouge) est ancré à ses extrémités, puis se courbe lorsqu'une contrainte de cisaillement τ est appliquée. Tant que cette contrainte est inférieure à la tension de ligne maximum associée au rayon de courbure minimum $R_c = L/2$, le segment trouve une courbure qui permet d'équilibrer la contrainte appliquée. (b) À partir d'une contrainte critique de cisaillement τ_c , la dislocation (en bleu marine) n'est plus à l'équilibre et s'étend progressivement (étapes en bleu clair puis en vert) pour finalement créer une nouvelle boucle et un nouveau segment identique à l'initial (en jaune).

4.2.2. Modèle de stockage-restauration

L'écrouissage a été largement étudié et est très documenté dans la littérature sur la plasticité des métaux (en particulier pour les CFC [Basinski et Basinski (1979), Kocks et Mecking (2003)]). Il est clairement établi que les interactions des dislocations sont à l'origine de l'écrouissage. Ce durcissement provient d'une part de l'ancrage des dislocations lorsqu'elles forment des jonctions avec des dislocations des autres plans de glissement (dislocations de la forêt) qui est le moteur de l'augmentation de la densité de dislocations et d'autre part de la contrainte nécessaire pour remobiliser des dislocations afin de déformer davantage et qui est fonction de cette densité croissante de dislocations.

Lorsqu'une dislocation rencontre une dislocation de la forêt qui lui fait obstacle, les deux dislocations peuvent fusionner pour créer un nouveau segment de dislocation appelé jonction^{**}. Les jonctions sont globalement sessiles puisqu'astreintes, au moins en leurs extrémités, à rester sur l'intersection des plans de glissement (voir figure 4.2 en section 4.2.3). Lors de la traversée d'une forêt de dislocations, la dislocation en mouvement est épinglée en plusieurs points par des jonctions et plus la densité de dislocations forêt est élevée plus la distance entre les points d'épingle est faible. Cela a pour conséquence d'engendrer une contrainte de cisaillement critique de plus en plus

^{**} S'il n'y a pas formation de jonction lorsque les deux dislocations se croisent (car cela n'est pas favorable en termes d'énergie élastique), seul un cran est créé sur les dislocations mais celui-ci ne perturbe en général pas notablement leur mobilité et il n'y a pas de phénomène d'ancrage.

élevée pour vaincre la tension de ligne qui s'oppose à la progression de la ligne entre deux obstacles. Si la tension de ligne est plus faible que la contrainte fournie à la dislocation, cette dernière se courbe et avance. Cela modifie l'équilibre des tensions de ligne des dislocations ayant fusionnées pour former des jonctions aux points d'épinglages (voir explications en section 4.2.3) et peut conduire au mécanisme de « dézippage » (unzipping) qui libère complètement la ligne jusqu'à ce qu'elle rencontre de nouveaux obstacles. Le modèle de la forêt (équation (4.1)) donne cette contrainte de cisaillement critique τ_f pour qu'il y ait écoulement plastique (appelé contrainte de la forêt depuis que son origine a été attribué aux jonctions par Friedel et Saada [[Friedel \(1967\)](#)]) en fonction de la densité de dislocations de la forêt ρ_f , c'est-à-dire la densité de dislocations des plans de glissement sécants^{††} donc pour lesquels il y a formation de jonctions avec ancrage.

Dans ce modèle, le coefficient d'interaction α représente la force moyenne des interactions entre dislocations. L'ordre de grandeur de ce coefficient pour les matériaux CFC est de 0,35 [[Saada \(1960\)](#), [Basinski et Basinski \(1979\)](#), [Madec et al. \(2002a\)](#)]. Le coefficient α présente par ailleurs une faible variation logarithmique et s'avère plus fort à faible densité et plus faible à forte densité. L'origine de cette déviation bien observée expérimentalement tient à l'énergie de ligne des dislocations intégrée entre leur rayon de cœur et une distance d'écrantage qui varie comme la distance entre dislocations.

Dans l'équation (4.1), la densité de dislocations évolue en fonction de la déformation de cisaillement global comme décrit par l'équation (4.3) proposée par Kocks et Mecking [[Kocks \(1976\)](#), [Kocks et Mecking \(2003\)](#)] :

$$\frac{d\rho}{d\varepsilon} = \frac{1}{b} \left(\frac{1}{L} - 2y_c\rho \right) \quad (4.3)$$

Elle traduit le fait que pour un incrément de déformation donné $d\varepsilon$, un incrément de densité $d\rho$ est obtenu. L'évolution de la densité est pilotée par l'ancrage/stockage des dislocations sur la forêt (inversement proportionnel au libre parcours moyen des dislocations $L \approx 1/\sqrt{\rho}$) et la restauration (proportionnelle au rayon de capture moyen des dislocations y_c). En effet, si la densité de dislocations augmente par ancrage son évolution est freinée par la restauration qui se produit lorsque les dislocations vis sont suffisamment proches pour s'annihiler par glissement dévié. En conséquence, plus la densité est forte, plus les dislocations sont proches et plus elles s'annihilent engendrant une saturation de la densité et donc de l'écrouissage.

Les modèles de plasticité cristalline, dits de stockage-restauration, ont évolué vers une description étendue aux cisaillements sur chaque système de glissement afin de

^{††} Plans sécants par rapport au plan de glissement des dislocations en mouvement, les jonctions formées entre dislocations d'un même plan sont complètement glissiles (i.e. mobile) dans ce plan.

décrire au mieux l'anisotropie viscoplastique des matériaux. Les équations (4.1) et (4.3) sont donc généralisées en considérant aussi les densités par systèmes. Ainsi, [Franciosi et Zaoui \(1982\)](#) ont proposé l'équation (4.4) pour décrire les interactions de la forêt sur chaque système, tandis que [Teodosiu et al. \(1991\)](#) a proposé l'équation (4.5) pour décrire l'évolution de la densité de dislocations sur chacun des systèmes.

$$\tau_c^s = \mu b \sqrt{\sum_{u=1}^{N_s} a^{su} \rho^u} \quad (4.4)$$

$$\frac{d\rho^s}{d\gamma^s} = \frac{1}{b} \left(\frac{1}{L^s} - 2y_c \rho^s \right) \quad (4.5)$$

L'équation (4.4) décrit la contrainte critique que doit contrebalancer le système s lorsqu'il rencontre l'ensemble des densités de dislocations des autres systèmes (N_s représente le nombre de systèmes). L'équation (4.5) donne l'incrément de densité $d\rho^s$ du système s , lorsque celui-ci produit un incrément de cisaillement $d\gamma^s$. Pour cette dernière équation, le terme de stockage des dislocations est toujours décrit comme l'inverse d'un libre parcours moyen des dislocations mais celui du système s noté L^s tandis que le terme de restauration est inchangé à cela près que la densité considérée est également celle du système s afin d'être cohérent avec un mécanisme d'annihilation par glissement dévié.

Notons que dans l'équation (4.4) plusieurs coefficients d'interactions a^{su} sont considérés alors que précédemment (équation (4.1)) un seul était pris en compte - α . Effectivement, lorsque deux dislocations se rencontrent, il existe plusieurs types de réactions possibles avec, d'une part les interactions dipolaires et d'autre part la formation de jonctions qui peuvent également être de types différents. Le modèle de Franciosi considère chaque type d'interaction tandis que le modèle de Taylor considère une interaction moyenne. Chaque type de réaction sera introduite en détail en section 4.2.5.

Ces modèles ont largement été utilisés pour décrire le durcissement des matériaux cristallins. Plus récemment, ils ont été calibrés autant que possible par DD principalement via le calcul des coefficients d'interaction associés aux réactions entre dislocations : d'abord dans le cas des CFC [[Madec et al. \(2003\)](#), [Devincre et al. \(2006\)](#), [Devincre et al. \(2008\)](#), [Alankar et al. \(2012\)](#), [Bertin et al. \(2014\)](#), [Madec et Kubin \(2017\)](#)], puis pour les matériaux CC à hautes températures (Cubique Centré) [[Madec et Kubin \(2004\)](#), [Queyreau et al. \(2009\)](#), [Madec et Kubin \(2017\)](#)] et enfin pour d'autres structures cristallographiques [[Bertin et al. \(2014\)](#), [Devincre \(2013\)](#), [Amodeo et al. \(2014\)](#)]. Ces études se situaient dans le régime athermique où les interactions jouent un rôle prépondérant. Lorsque l'effet des interactions est couplé fortement à la difficile mobilité des dislocations du régime thermiquement activé, d'autres lois d'échelle sont

proposées pour la plasticité cristalline. Il s'agit essentiellement de modèles scalaires [Rauch (1994), Tang et al. (1999)] même si une première forme matricielle en partie calibrée pour le fer a récemment été proposée [Monnet et al. (2013)]. On notera dans ce dernier cas que les coefficients d'interaction athermique comme d'autres paramètres cette fois spécifiques pour le régime d'activation thermique sont utilisés pour dériver un écrouissage *a priori* valable quel que soit l'intensité de l'activation thermique. Mais l'obtention des paramètres basses températures suppose de connaître l'effet de l'activation thermique sur la forme des boucles de dislocations qui n'est pas encore clairement établi pour l'UO₂.

4.2.3. Formation de jonction

Nous avons introduit dans la section précédente la notion de « jonction » entre dislocations mais sans préciser vraiment comment elle se forme et pour quelle raison. Nous allons dans cette section présenter de façon plus précise ce que c'est avec notamment sa géométrie et détailler l'énergétique associée qui permet de distinguer les différents types.

Lorsque deux dislocations sont proches, elles interagissent via leurs champs de contrainte ce qui mène à un réarrangement des lignes pour minimiser l'énergie élastique associée au système. La formation d'une jonction est une conséquence de cette minimisation, que l'on peut traiter de façon simplifiée comme un simple bilan d'énergie élastique de ligne de dislocations. Les caractéristiques de cette jonction, qui est une nouvelle dislocation formée par fusion des deux dislocations au contact, dépendent de celles des dislocations parentes à savoir :

- le vecteur de Burgers de la jonction :

$$\vec{b}_j = \vec{b}_1 + \vec{b}_2 \quad (4.6)$$

- la direction de formation de la jonction à l'intersection des plans de glissement des dislocations parentes :

$$\vec{l}_j = \vec{n}_1 \times \vec{n}_2 \quad (4.7)$$

- et parfois le plan d'habitat de la jonction (typiquement si elle est glissile) :

$$\vec{n}_j = \vec{b}_j \times \vec{l}_j \quad (4.8)$$

L'indice j désigne la jonction tandis que 1 et 2 désignent les dislocations parentes. Ainsi, il n'y a qu'une seule jonction possible pour chaque couple de systèmes quel que soit le caractère des dislocations sur les systèmes parents.

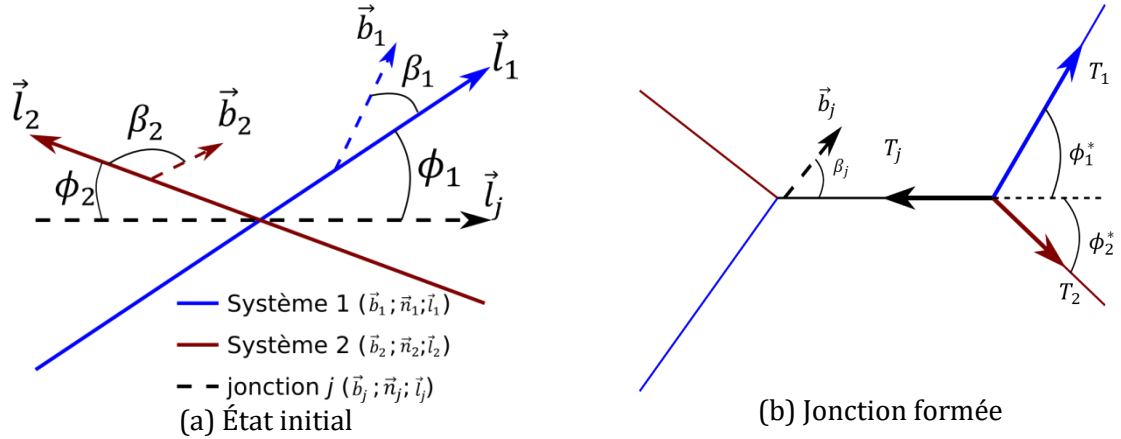


figure 4.2 : Formation d'une jonction lorsque deux dislocations parentes, de même longueur et appartenant à des plans de glissement différents, se croisent en leur milieu (a). La jonction se développe le long de l'intersection des plans de glissement des dislocations parentes (b).

Pour illustrer ce mécanisme, considérons une configuration simple de deux dislocations de même longueur, se croisant en leur milieu (voir figure 4.2(a)). Selon notre approximation, les segments sont rigides et sans interactions [Puschl (1985), Madec et al. (2002b)]. On note initialement ϕ_1 et ϕ_2 les angles formés entre les dislocations parentes 1 et 2 et la direction de jonction, et β_1 et β_2 les caractères de ces dislocations (c'est-à-dire l'angle par rapport au vecteur de Burgers). Lors de la création de la jonction, le point d'intersection (ou nœud quadruple) au croisement des deux dislocations parentes se dissocie en deux nœuds triples qui s'éloignent l'un de l'autre (comme illustré en figure 4.2(b)). Les angles ϕ_1 et ϕ_2 et les caractères des dislocations évoluent lorsque les points triples s'écartent (on notera ϕ_1^* et ϕ_2^* ces mêmes angles à l'état d'équilibre après formation de jonction). Pour qu'il y ait formation de la jonction, il faut que la somme des tensions de ligne T_i (projetée sur l'axe de la jonction) tendent à écarter les nœuds triples jusqu'à atteindre un état stable où elles s'équilibrent comme illustré en figure 4.2(b). La géométrie globale étant symétrique, on peut se concentrer sur un seul des deux nœuds. On a donc l'équation de bilan suivante :

$$T_j = T_1 \cos(\phi_1^*) + T_2 \cos(\phi_2^*) \quad (4.9)$$

D'un point de vue énergétique, la tension de ligne est la dérivée de l'énergie de ligne E_i par rapport à la longueur du segment l_i (voir équation (4.10)) qui dépend, en élasticité isotrope, de μ et du coefficient de Poisson ν , du vecteur de Burgers et du caractère de la ligne (voir équation (4.11) et (4.12)) :

$$T_i = \frac{dE_i}{dl_i} = \frac{\partial E_i}{\partial l_i} + \frac{\partial E_i}{\partial \phi_i} \frac{\partial \phi_i}{\partial l_i} \quad (4.10)$$

avec :

$$E_i = \frac{l_i \mu b^2}{4\pi(1-\nu)} f(\beta_i) \quad (4.11)$$

et :

$$f(\beta_i) = 1 - \nu \cos^2(\beta_i) \quad (4.12)$$

À partir des équations de (4.10) à (4.12) on peut obtenir la tension de ligne :

$$T_i = [f(\beta_i) - \tan(\phi_1^*) f'(\beta)] \frac{\mu b^2}{4\pi(1-\nu)} \quad (4.13)$$

avec :

$$f'(\beta_i) = \nu * 2 \cos(\beta) \sin(\beta) \quad (4.14)$$

Dans la suite nous utiliserons plus souvent l'expression « bilan d'énergie » plutôt que « bilan des tensions de ligne », les deux approches étant équivalentes et menant aux mêmes résultats.

4.2.4. Approximation isotrope de l'anisotropie élastique

À l'aide du logiciel DisDi [Douin, Douin et al. (1986)], nous avons tracé les énergies et tensions de ligne en élasticité anisotrope pour chaque mode de glissement de l'UO₂ en figure 4.3. Pour cela il suffit de spécifier au logiciel les constantes élastiques anisotropes présentées en section 3.3.2 page 61, le paramètre de maille ainsi que le plan et le vecteur de Burgers du système. Notons, que pour l'ensemble des systèmes d'un même mode, le résultat est le même.

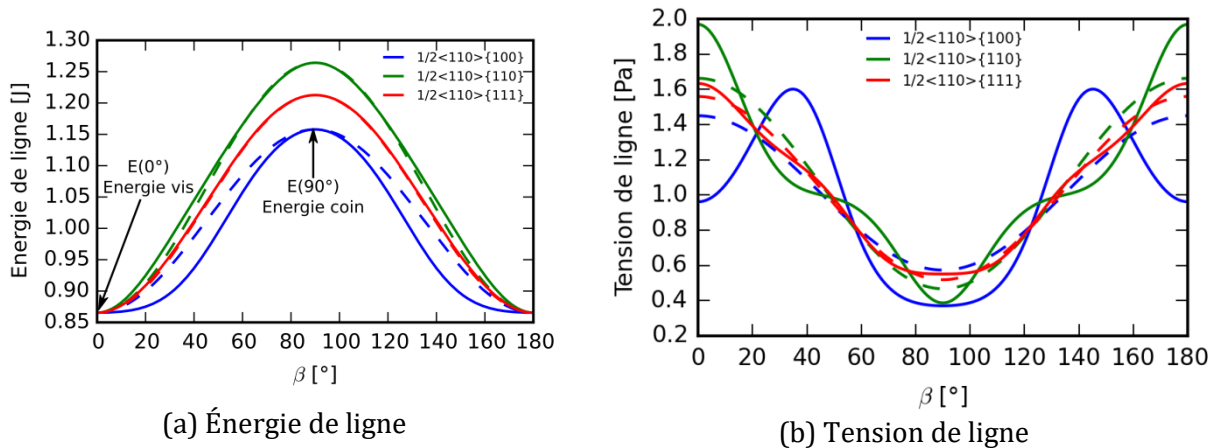


figure 4.3 : (a) Énergie et (b) tension de ligne en fonction du caractère de la dislocation pour les trois modes de glissement principaux à 1373 K. Les tirets représentent les cas de Bacon-Scattergood.

L'anisotropie élastique rend plus coûteux en ressources informatiques les calculs de DD effectués plus loin en section 4.4.2, c'est pourquoi on utilisera souvent une approximation proposée par [Bacon et al. \(1980\)](#). Elle consiste à conserver une forme isotrope de l'élasticité mais à l'ajuster pour reproduire les énergies anisotropes des dislocations vis et coin qui sont alors exactes (voir figure 4.3(a)). L'approximation porte sur la forme de l'énergie entre les orientations coin et vis. Il y a autant de constantes élastiques μ_{BS} et ν_{BS} que de types de systèmes de glissement. Cette approximation à mi-chemin entre isotrope et anisotrope, a été utilisée pour décrire la courbure à l'équilibre des segments ou des boucles de dislocations sous contrainte pour finalement être comparée aux résultats anisotropes [[Aubry et al. \(2011\)](#), [Loridon \(2016\)](#)], puis utilisée en DD pour les CFC et CC [[Loridon \(2016\)](#), [Madec et Kubin \(2017\)](#)] ainsi que pour les HCP [[Lorne \(2016\)](#)]. Ces coefficients élastiques sont définis de la manière suivante :

$$\mu_{BS} = \frac{4\pi E_{vis}}{b^2} = \frac{4\pi E(0^\circ)}{b^2} \quad (4.15)$$

$$\nu_{BS} = 1 - \frac{E_{vis}}{E_{coin}} = 1 - \frac{E(0^\circ)}{E(90^\circ)} \quad (4.16)$$

Les constantes élastiques de Bacon et Scattergood pour chaque mode et chaque type de jonctions, sont données dans le tableau 4.1 pour les différentes températures considérées dans la suite de l'étude. Ces constantes seront utilisées pour les calculs élastiques simplifiés et les calculs de DD présentés plus loin dès qu'on utilisera une approximation isotrope.

Les énergies de ligne calculées avec ces coefficients pour les trois modes de glissement sont données en tirets sur la figure 4.3(a) et montrent une faible différence pour les systèmes $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{110\}$ et $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{111\}$. Pour $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{100\}$ l'écart entre l'évolution de l'énergie anisotrope avec celle de l'approximation de Bacon-Scattergood est plus marquée ce qui montre une plus forte anisotropie pour ce mode.

tableau 4.1 : Constantes élastiques définies selon la méthode de Bacon et Scattergood [[Bacon et al. \(1980\)](#)] pour approcher l'anisotropie du matériau pour chaque mode de glissement et pour les températures 1373 K, 1600 K et 1973 K.

	1373 K		1600 K		1973 K	
	μ_{BS} (GPa)	ν_{BS}	μ_{BS} (GPa)	ν_{BS}	μ_{BS} (GPa)	ν_{BS}
$\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{100\}$	72,7	0,25	68,5	0,26	61,4	0,27
$\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{110\}$	72,7	0,32	68,5	0,32	61,4	0,32
$\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{111\}$	72,7	0,29	68,5	0,29	61,4	0,30
$\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{211\}$	72,7	0,26	68,5	0,27	61,4	0,28
$\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{311\}$	72,7	0,25	68,5	0,26	61,4	0,27
$\langle 100 \rangle \{100\}$	55,7	0,48	53,6	0,46	50,3	0,44
$\langle 100 \rangle \{210\}$	55,7	0,47	53,6	0,46	50,3	0,44

tableau 4.2 : Matrice d'interaction de l'UO₂. Les numéros pour chaque mode de glissement font références aux systèmes donnés dans le tableau 2.1. Chaque ligne représente un système mobile, chaque colonne un système obstacle et chaque case à l'intersection ligne/colonne un coefficient d'interaction. En bleu on retrouve l'auto-écrouissage, en jaune les coefficients dipolaires et en rouge, les coefficients colinéaires. Tous les couples de coefficients avec une étoile sont asymétriques (par exemple a_{18} diffère de a_{18}^* car la tension de ligne n'est pas équivalente dans les deux systèmes de glissement parents).

		Systèmes obstacles (forêt)																							
		$\frac{1}{2}\langle 110 \rangle\{100\}$						$\frac{1}{2}\langle 110 \rangle\{110\}$						$\frac{1}{2}\langle 110 \rangle\{111\}$											
		1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	13	17	18	19	20	21	22	23	24
		1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	13	17	18	19	20	21	22	23	24
Systèmes mobiles	$\frac{1}{2}\langle 110 \rangle\{100\}$	1	0	1	2	2	2	3	4	5	5	5	5	6	6	7	7	8	9	8	9	8	9	8	9
		2	1	0	2	2	2	4	3	5	5	5	5	7	7	6	6	9	8	9	8	9	8	9	8
		3	2	2	0	1	2	5	5	3	4	5	5	9	8	9	8	6	6	7	7	8	9	9	8
		4	2	2	1	0	2	5	5	4	3	5	5	8	9	8	9	7	7	6	6	9	8	8	9
		5	2	2	2	2	0	5	5	5	5	3	4	9	8	8	9	8	9	9	8	6	6	7	7
		6	2	2	2	2	1	5	5	5	5	4	3	8	9	9	8	9	8	8	9	7	7	6	6
	$\frac{1}{2}\langle 110 \rangle\{110\}$	7	3	4*	5*	5*	5*	0	10	11	11	11	11	12	12	13	13	14	15	14	15	14	15	14	15
		8	4*	3	5*	5*	5*	10	0	11	11	11	11	13	13	12	12	15	14	15	14	15	14	15	14
		9	5*	5*	3	4*	5*	11	11	0	10	11	11	15	14	15	14	12	12	13	13	14	15	15	14
		10	5*	5*	4*	3	5*	11	11	10	0	11	11	14	15	14	15	13	13	12	12	15	14	14	15
		11	5*	5*	5*	5*	3	11	11	11	11	0	10	15	14	14	15	14	15	15	14	12	12	13	13
		12	5*	5*	5*	5*	4*	11	11	11	11	10	0	14	15	15	14	15	14	14	15	13	13	12	12
	$\frac{1}{2}\langle 110 \rangle\{111\}$	13	6	7*	9*	8*	9*	12	13*	15*	14*	15*	14*	0	16	17	17	18	19	20	18*	18	19	20	18*
		14	6	7*	8*	9*	8*	12	13*	14*	15*	14*	15*	16	0	17	17	20	18*	18	19	20	18*	18	19
		15	7*	6	9*	8*	8*	13*	12	15*	14*	14*	15*	17	17	0	16	19	18	18*	20	18*	20	19	18
		16	7*	6	8*	9*	9*	13*	12	14*	15*	15*	14*	17	17	16	0	18*	20	19	18	19	18	18*	20
		17	8*	9*	6	7*	8*	14*	15*	12	13*	14*	15*	18*	20	19	18	0	16	17	17	20	18*	19	18
		18	9*	8*	6	7*	9*	15*	14*	12	13*	15*	14*	19	18	18*	20	16	0	17	17	18	19	18*	20
		19	8*	9*	7*	6	9*	14*	15*	13*	12	15*	14*	20	18*	18	19	17	17	0	16	19	18	20	18*
		20	9*	8*	7*	6	8*	15*	14*	13*	12	14*	15*	18	19	20	18*	17	17	16	0	18*	20	18	19
		21	8*	9*	8*	9*	6	14*	15*	14*	15*	12	13*	18*	20	18	19	20	18*	19	18	0	16	17	17
		22	9*	8*	9*	8*	6	15*	14*	15*	14*	12	13*	19	18	20	18*	18	19	18*	20	16	0	17	17
		23	8*	9*	9*	8*	7*	14*	15*	15*	14*	13*	12	20	18*	19	18	19	18	20	18*	17	17	0	16
		24	9*	8*	8*	9*	7*	15*	14*	14*	15*	13*	12	18	19	18*	20	18*	20	18	19	17	17	16	0

4.2.5. Matrice d'interaction de l'UO₂

Le dioxyde d'uranium ayant 24 systèmes de glissement, la matrice d'interaction a^{su} de l'équation (4.4) contient 24×24 interactions possibles (voir le tableau 4.2). Dans cette matrice, chaque case donne un numéro de coefficient d'interaction. Beaucoup d'interactions sont associés au même numéro de coefficient. Ces interactions pour ces couples de systèmes sont identiques en raison des symétries de la cristallographie de l'UO₂. Dans le tableau 4.3 nous avons donné les caractéristiques des 21 interactions possibles associées aux coefficients d'interaction de l'UO₂.

tableau 4.3 : Liste des coefficients. Les numéros de coefficients comportant une étoile sont des coefficients pouvant être asymétriques. Le numéro associé aux différentes jonctions glissiles fait référence au mode de glissement de l'UO₂ tandis qu'il sert uniquement à distinguer les différents types de plan pour les jonctions sessiles. La jonction de Lomer des CFC devient alors dans UO₂ la glissile 1 car son plan de glissement potentiel dans les CFC est un plan de glissement avéré dans l'UO₂. Pour l'interaction colinéaire on précise l'angle entre les plans de glissement.

N° coefficient	Type de coefficient	Jonction	N° coefficient	Type de coefficient	Jonction
$a0$	auto-écrouissage	-	$a11$	Lomer 2	$\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{112\}$
$a1$	dipolaire	-	$a12$	colinéaire	35°
$a2$	glissile 2	$\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{110\}$	$a13^*$	Hirth 2	$\langle 100 \rangle \{012\}$
$a3$	colinéaire	90°	$a14^*$	Lomer 3	$\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{113\}$
$a4^*$	Hirth	$\langle 100 \rangle \{100\}$	$a15^*$	glissile 3	$\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{111\}$
$a5^*$	glissile 1	$\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{100\}$	$a16$	colinéaire	70°
$a6$	colinéaire	55°	$a17$	Hirth	$\langle 100 \rangle \{100\}$
$a7^*$	Hirth	$\langle 100 \rangle \{100\}$	$a18^*$	glissile 3	$\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{111\}$
$a8^*$	glissile 3	$\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{111\}$	$a19$	Dipolaire	-
$a9^*$	glissile 3	$\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{111\}$	$a20$	glissile 1	$\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{100\}$
$a10$	Hirth	$\langle 100 \rangle \{100\}$			

Parmi tous ces coefficients, certains représentent les interactions à distance car aucune réaction ne se produit entre dislocations de plans parallèles distincts ($\vec{n}_1 = \vec{n}_2$). Ces interactions sont dites dipolaires mais on en distingue deux :

- L'« auto-écrouissage », lorsque les dislocations d'un même système interagissent ($\vec{b}_1 = \vec{b}_2$),
- Les interactions « Dipolaire » à proprement parler, lorsque les plans sont parallèles mais les Burgers sont différents ($\vec{b}_1 \neq \vec{b}_2$)

Dans ces deux cas il y a formation de dipôles c'est-à-dire que des dislocations attractives s'approchent et s'alignent selon une direction commune tout en restant dans leurs plans de glissement parallèles et proches (voir figure 4.4). Le glissement dévié des dislocations vis permet l'annihilation des dipôles vis dans le cas de l'auto-écrouissage et induit un transfert de la densité de dislocations dans le plan de déviation [Devincre et al. (2007)].

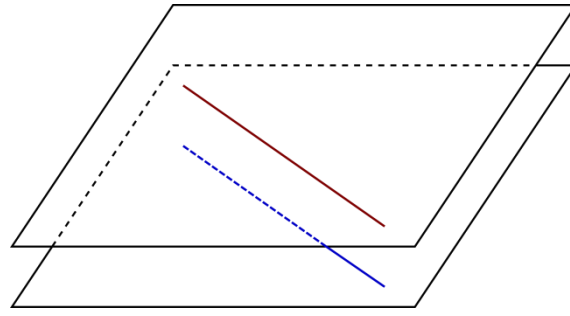


figure 4.4 : Schéma d'une interaction dipolaire – Dislocations attractives appartenant à deux plans parallèles distincts qui s'alignent suivant une direction donnée.

On trouve également les coefficients avec des dislocations qui peuvent venir au contact et réagir ($\vec{n}_1 \neq \vec{n}_2$) en formant ou non des jonctions. Dans le cas où il y a formation de jonctions ($\vec{b}_1 \neq \vec{b}_2$) (typiquement illustrée figure 4.2(b)), on a :

- des jonctions de type « Lomer », c'est-à-dire sessiles avec un vecteur de Burgers du même type que les dislocations standards $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle$,
- des jonctions glissiles avec une énergétique proche des jonctions de Lomer. Ce sont des jonctions dont leur vecteur de Burgers est de même type que celui de la Lomer mais, comme leur nom l'indique, qui sont formées sur un plan où la jonction peut glisser,
- et enfin des jonctions de type « Hirth » qui sont sessiles mais avec un vecteur de Burgers de type $\langle 100 \rangle$ qui est plus long et minimise moins bien l'énergie.

Dans le cas où il n'y a pas formation de jonction, les dislocations ont des vecteurs de Burgers colinéaires (et en fait égaux au signe près : $\vec{b}_1 = -\vec{b}_2$). Cette interaction est dite colinéaire et est un cas particulier de la jonction, on a une annihilation des dislocations par recombinaison des lignes exactement comme pour les jonctions, à la différence près que $\vec{b}_j = \vec{0}$. Il n'y a donc pas de jonction mais seulement des résidus de réaction qui sont les bras de jonctions, et qui sont ancrés au niveau des nœuds triples (ou plutôt nœud double ici) assurant le passage entre les deux plans de glissement (voir figure 4.5).

Dans le matériau, si la température est suffisamment élevée pour que l'on soit en régime athermique, on a une répartition *a priori* homogène de tous les caractères pour les dislocations parentes même si les boucles pourraient être un peu allongées dans la direction vis de plus faible énergie. La force du coefficient d'interaction va dépendre de la probabilité de formation de jonction intégrée sur l'ensemble des caractères de dislocations, ainsi que de la résistance sous contrainte de ces jonctions.

Pour évaluer la probabilité de formation des jonctions, on peut effectuer des cartographies angulaires [Puschl (1985), Wickham et al. (1999)]. En fonction du couple d'orientation initiale des dislocations parentes ϕ_1 et ϕ_2 , on précise s'il y a recombinaison ou non. Cette étude sera présentée plus loin en section 4.4.1.

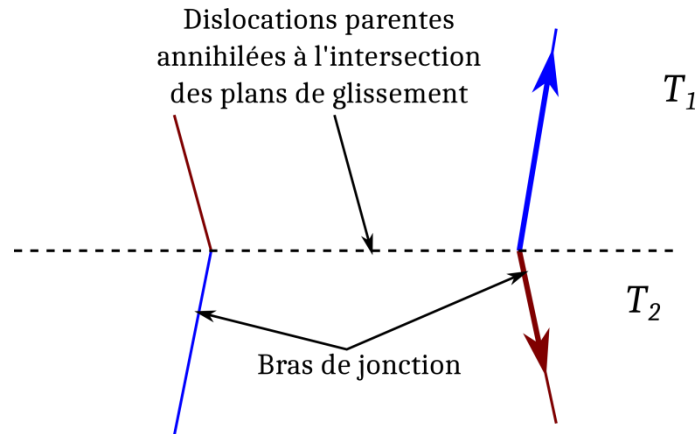


figure 4.5 : Schéma d'une annihilation colinéaire – réaction apparentée à une jonction, les dislocations parentales s'annihilent à l'intersection des plans de glissement laissant des bras de « jonction » ancrés aux nœuds doubles.

Lorsqu'une jonction est sous contrainte, les bras de jonctions se courbent, modifiant la tension de ligne au niveau du nœud triple. Ceci pouvant mener, à terme, au dézippage de la jonction jusqu'à sa destruction (voir figure 4.6). La résistance sous contrainte des jonctions n'est pas donnée par la cartographie car elle dépend de la géométrie de la jonction mais aussi de la tension de ligne du bras de jonction sous contrainte qui joue le rôle important dans le dézippage [Saada (1960), Shin et al. (2001), Madec et al. (2002c), Dupuy et Fivel (2002)].

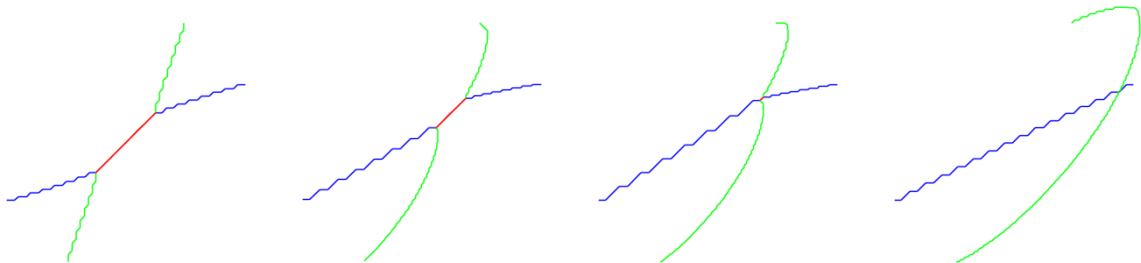


figure 4.6 : « Dézippage » (ou unzipping) d'une jonction glissile du cuivre sous contrainte en élasticité anisotrope à 300 K (d'après Loridon (2016)).

En effet, la tension de ligne du système sous contrainte s'oppose à la remobilisation des dislocations pour continuer à déformer. Ce rôle important de la tension de ligne du système mobile est le principal ingrédient de l'asymétrie de certains coefficients [Madec et Kubin (2017)], d'où la mention des systèmes mobiles et obstacles du tableau 4.2. En effet, même quand les systèmes de glissement sont du même type (et donc leurs tensions de ligne et sa dépendance angulaire identiques), si les vecteurs de Burgers ne sont pas positionnés de façon symétrique de part et d'autre de l'intersection des plans, la tension de ligne intégrée sur la microstructure sera différente. Effectivement, la formation de jonctions tend à allonger les boucles de dislocation selon la direction de jonctions et affecte la distribution angulaire des dislocations. Cette direction privilégiée n'étant alors pas associée à un même caractère dans les 2 systèmes de glissement, la

tension de ligne rencontrée pour dézipper une jonction ne sera pas la même non plus. En pratique les jonctions formées selon l'orientation vis d'un système de glissement (ou une orientation proche de la vis) conduisent à des coefficients d'interaction plus forts^{##}.

4.3. Dynamique des dislocations

Si des valeurs de coefficients d'interactions peuvent être estimées par durcissement latent [Alexander et Crawford (2000)], le calcul direct de coefficients se fait maintenant surtout par DD [Madec et al. (2003)]. Le principe de cette méthode est de simuler la plasticité d'un volume de taille inaccessible par Dynamique Moléculaire (DM). La solution consiste à ne pas traiter la matière atome par atome comme en DM, avec les petites échelles d'espace et de temps que ça implique, mais en considérant que la matière est un continuum élastique. L'objet considéré est alors un segment de dislocation et on utilise la théorie élastique des dislocations à la place des potentiels interatomiques de la DM.

On considère les propriétés élastiques des dislocations qui permettent typiquement d'étudier en bonne approximation leurs interactions en négligeant la structure de cœur comme par exemple l'effet de la dissociation. Il est cependant possible de considérer des phénomènes qui sont en partie pilotés par la structure atomique des dislocations si c'est nécessaire en appliquant des règles locales. C'est typiquement le cas pour la mobilité thermiquement activée des dislocations et le glissement dévié. Malheureusement, dans l' UO_2 peu d'informations fiables en provenance de l'échelle atomique sont disponibles comme nous l'avons indiqué en section 2.5.2 page 32.

4.3.1. Discrétisation de l'espace

Le volume de la simulation est typiquement de plusieurs microns voire dizaines de microns de côté, le plus souvent parallélépipédique afin de pouvoir optimiser les flux de dislocations [Madec et al. (2004)] lors de l'utilisation de conditions aux limites périodiques (CLPs). Ces dernières sont nécessaires pour s'affranchir des pertes de dislocations en surfaces ce qui est particulièrement utile quand on s'intéresse comme ici à l'écrouissage en masse.

On utilise un réseau homothétique de la cristallographie étudiée donc cubique dans le cas de l' UO_2 (quadrillage sur la figure 4.7 et la figure 4.8). Sa finesse peut être ajustée en fonction de la densité de dislocations et donc de leurs distances caractéristiques. Il faut également que ce pas de réseau soit plus petit que la distance d'annihilation des dislocations vis par glissement dévié si on souhaite évaluer son effet. Ce ne sera pas

^{##} Voir figure 4.3(b) pour les modes $\{110\}$ et $\{111\}$ en anisotrope et tous les modes dans le cas de l'approximation de Bacon-Scattergood.

nécessaire dans le cas de nos simulations, visant à calculer les coefficients d'interaction, où le glissement dévié n'intervient pas.

4.3.2. Discrétisation des lignes de dislocation

Les dislocations introduites dans le volume sont discrétisées par une suite de segments connectés les uns aux autres pour approximer leur géométrie. Notons qu'initialement les segments ne pouvaient prendre que des caractères coins et vis menant à une description en escalier des dislocations [Kubin et al. (1992), Verdier et al. (1998)]. Madec (2001) améliora cette description en ajoutant des caractères mixtes dans le code de DD (voir figure 4.7). Dans la version actuelle du code de DD (MobiDiC développé au CEA/DAM), il n'y a pas de limitation du nombre d'orientations de segments par système de glissement. L'intérêt est de mieux décrire la courbure des lignes en utilisant moins de segments allégeant ainsi également les calculs et surtout de pouvoir décrire les jonctions plus facilement et précisément.

Dans le cas de l' UO_2 , nous avons choisi de décrire la courbure des dislocations à l'aide de 8 vecteurs lignes pour les dislocations du mode $\{100\}$ et 12 vecteurs lignes pour les dislocations du mode $\{110\}$ et $\{111\}$. C'est le nombre de vecteurs minimum pour avoir toutes les directions de recombinaisons (jonction et annihilation) pour l' UO_2 (voir les bases de vecteurs en Annexe D).

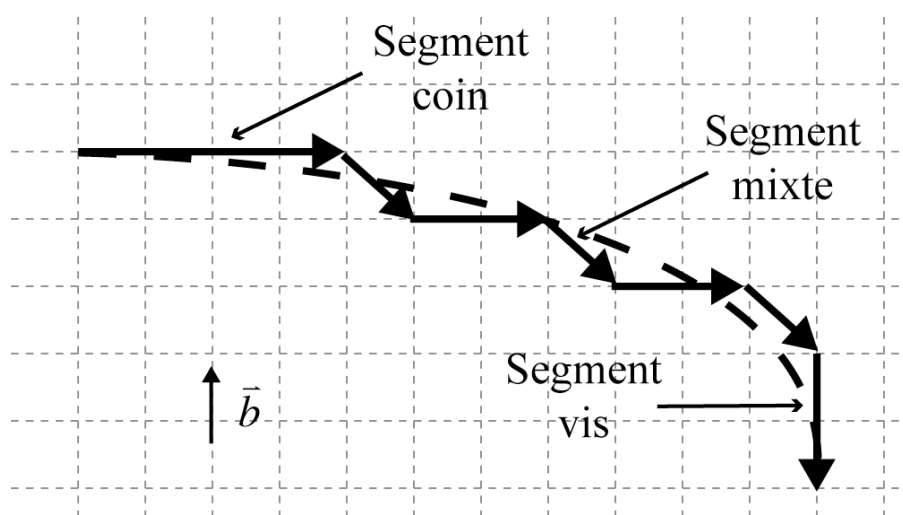


figure 4.7 : Schéma d'une discrétisation d'une ligne en segments coins, vis et mixtes dans son plan de glissement. Les segments, disposés sur le réseau homothétique de la maille cristalline, ont une taille maximale fixée par la longueur de discrétisation et se déplacent perpendiculairement à leur vecteur ligne (image d'après Amodeo (2011)).

4.3.3. Mobilité des dislocations

La loi de vitesse des dislocations est une entrée du code de DD. Dans notre cas, nous avons utilisé une loi linéaire en contrainte, suivant ce qui est proposé pour le régime athermique (équation (2.12) page 30, rappelée ici) :

$$v = \frac{\tau b}{B}$$

avec une valeur de la viscosité qui traduit principalement les interactions dislocation/phonons $B = 1,5 \cdot 10^{-5}$ Pa.s [Fusenig et Nembach (1993)], c'est-à-dire égale à celle du cuivre mais qui n'aura pas d'impact sur la valeur des coefficients calculés.

Ce type de loi n'est *a priori* pas adapté pour l'UO₂ sauf au voisinage de 2000 K pour les dislocations du mode {100} car à plus faible température le mouvement des dislocations est thermiquement activé. Mais les caractères les plus mobiles sur chaque mode de glissement n'ont pas encore été définis avec certitude (voir section 2.5.2 page 32), ce qui nous empêche de définir des lois de mobilité fiables. Notons que la loi de double-décrochements que nous avons ajustée en section 3.3.4.1 page 73 peut être applicable pour le calcul de DD une fois identifié le caractère contrôlant le glissement.

Enfin, utiliser une loi athermique pour calculer les coefficients permet d'extraire la force intrinsèque des interactions, et ainsi de majorer leur effet. Ces coefficients seront à terme utilisables dans un modèle complet capable de gérer la transition entre le régime d'activation thermique (où il y a couplage intime entre mobilité et interaction) et le régime athermique (dans lequel la loi de mobilité contribue peu) (voir par exemple Tang et al. (2001) pour un modèle scalaire pour le tantale et Monnet et al. (2013) pour une première tentative de modèle matriciel pour le fer).

4.3.4. Calcul des interactions

La contrainte de cisaillement effective τ_{eff} au centre du segment se calcule à partir de l'équation (4.17) qui considère :

- la contrainte de Peach-Koehler τ_{PK} ,
- la tension de ligne avec les premiers voisins τ_l ,
- et une contrainte de friction qui correspond typiquement à une contrainte de Peierls résiduelle τ_P (cette dernière est toujours résistive et s'oppose à la somme des autres composantes).

$$\tau_{eff} = \tau_{PK} + \tau_l + \tau_P \quad (4.17)$$

La contrainte de Peach-Koehler se calcule à partir de la force de Peach-Koehler qui représente la contrainte appliquée au segment $\bar{\sigma}_{app}$ additionnée aux contraintes internes $\bar{\sigma}_{int}$, projetée dans la direction de glissement (voir équation (4.18)).

$$\vec{F}_{PK} = \tau_{PK} \vec{b} = ((\bar{\sigma}_{app} + \bar{\sigma}_{int}) \cdot \vec{b}) \times \vec{l} \quad (4.18)$$

Les contraintes internes proviennent des interactions élastiques avec les autres dislocations. Notons que les interactions élastiques des premiers voisins ne sont pas considérées dans le calcul de la contrainte interne d'un segment car elles sont prises en compte par ailleurs sous la forme d'une tension de ligne. La discrétisation en segments droits des dislocations conduit à une sous-estimation de la rigidité de la ligne quand elle est courbée sous l'effet d'une contrainte appliquée. La tension de ligne se calcule en considérant une ligne courbée passant par les centres du segment considéré et de ses premiers voisins (voir figure 4.8). On peut par exemple utiliser la tension de ligne de [deWit et Koehler \(1959\)](#) ou de [Bacon et al. \(1980\)](#).

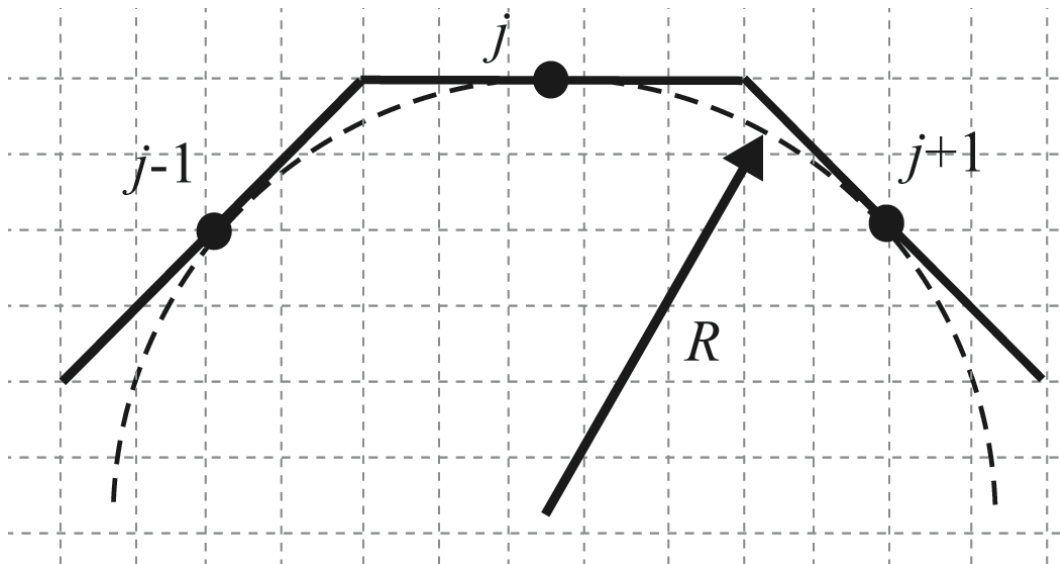


figure 4.8 : Géométrie pour le calcul de la tension de ligne. L'interaction élastique entre le segment j et les segments j-1 et j+1 est modélisée en remplaçant les trois segments par un arc de cercle qui passe en leurs centres c'est-à-dire en faisant une approximation de courbure continue pour dériver la tension de ligne associée (figure d'après [Amodeo \(2011\)](#)).

Le calcul de la contrainte interne qui est la somme des contraintes induites par tous les segments au centre de chaque segment est de loin la partie la plus coûteuse en DD (en $N_{segments}^2$), que ce soit en élasticité isotrope [[Devincere \(1995\)](#)] mais en particulier en élasticité anisotrope [[Aubry et Arsenlis \(2013\)](#)]. Dans ce dernier cas, on utilise une procédure optimisée par Dupuy et développée pour le code NumoDis. Le coût de calcul dépend aussi des conditions aux limites et du rayon de coupure utilisé pour les CLPs. Dans notre cas le rayon de coupure est de l'ordre de 5 μm pour une boîte de 10 μm . C'est-à-dire que les segments n'interviennent qu'une fois dans chaque calcul de contrainte et que les segments images ne sont pas pris en compte. Pour réduire le coût

de calcul, sinon prohibitif, on utilise une approximation [Verdier et al. (1998)] appelée « Méthode des boîtes » qui consiste à définir des boîtes dans le volume de simulation, comme illustré sur la figure 4.9, afin de différencier les interactions élastiques à courtes et longues distances. Ainsi toutes les dislocations situées dans des boîtes qui ne sont pas adjacentes à celle du segment étudié, sont considérées comme étant à longue distance. On calcule alors seulement périodiquement le champ de contrainte que produisent ces dislocations sur le centre de la boîte du segment considéré et on applique ce même champ de contrainte à tous les segments de la boîte.

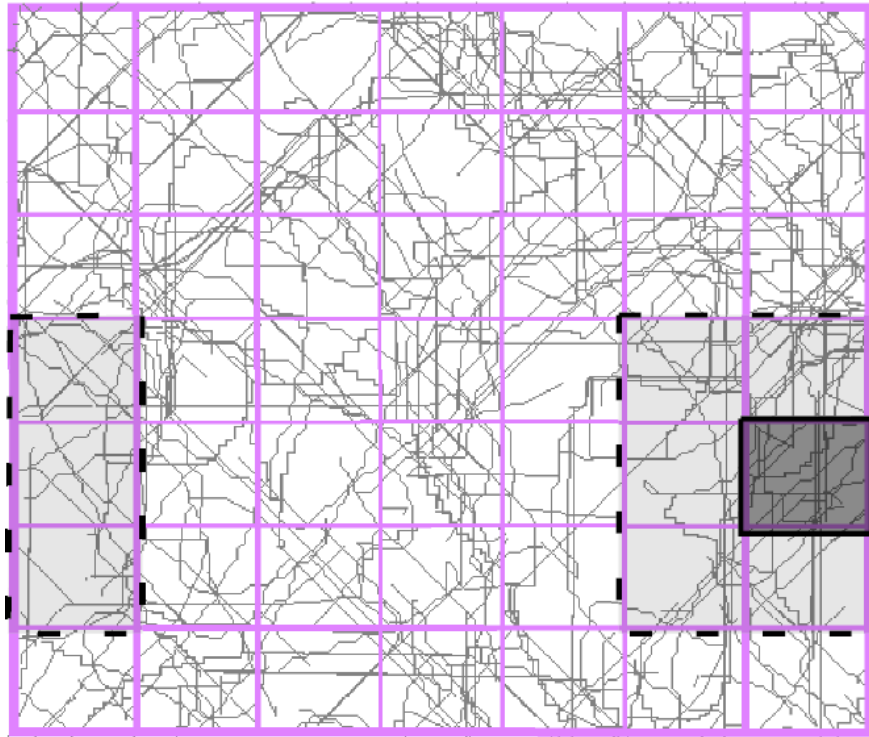


figure 4.9 : Méthode des boîtes pour calculer les contraintes internes. En noir, la boîte sur laquelle s'effectue le calcul ; en pointillés les boîtes à courtes distance et les autres à longue distance (figure d'après Madec (2001)).

4.4. Interactions des dislocations à l'aide de la DD

4.4.1. Cartographie des réactions

Comme nous l'avons spécifié dans la section 4.2.5, la force du coefficient va dépendre de la probabilité de formation de la réaction associée (jonction ou annihilation). Autrement dit, plus cette probabilité est forte plus le coefficient d'interaction peut également être fort. Pour illustrer cette probabilité, on cartographie la formation de jonctions en fonction des couples d'orientations initiales des dislocations parentes ϕ_1 et ϕ_2 . Ce type d'étude a régulièrement été réalisé dans la littérature [Puschl (1985), Wickham et al. (1999)] car c'est un outil efficace pour analyser au moins qualitativement les interactions entre dislocations. Madec analyse ces cartographies avant de calculer les

coefficients d'interaction et met en évidence l'augmentation de la probabilité de formation des jonctions et du coefficient avec l'anisotropie élastique croissante (en utilisant l'approximation de Bacon-Scattergood) dans le cas de la jonction de Hirth et de façon plus générale globalement pour les réactions entre dislocations étudiées [Madec et Kubin (2017)].

De plus, c'est un outil efficace pour analyser les différentes hypothèses d'isotropie élastique [Loridon (2016)] comme présenté plus loin. Car le calcul en élasticité anisotrope est très coûteux et avec la quantité élevée de coefficient à calculer pour l'UO₂, il est nécessaire de penser au temps de calcul associé.

4.4.1.1. Type de réaction lorsque deux dislocations se croisent

Le principe des cartographies consiste à identifier les couples d'orientation (ϕ_1, ϕ_2) pour lesquels il y a formation de jonction (ou annihilation) en absence de contrainte appliquée lorsque deux dislocations se croisent en leur milieu (voir figure 4.2). Dans le cas où il n'y a pas réaction entre les dislocations qui se croisent, il existe deux cas bien distincts : l'état croisé [Wickham et al. (1999), Madec et al. (2002b)] et la répulsion (voir figure 4.10). L'état croisé se produit lorsque les dislocations parentes s'attirent jusqu'à se toucher mais lorsque la tension de ligne au niveau du nœud quadruple ne lui permet pas de se dissocier en deux nœuds triples pour former une recombinaison (comme expliqué en section 4.2.3 lors de la formation de jonction). La répulsion se produit lorsque la relaxation du système tend à éloigner les dislocations l'une de l'autre.

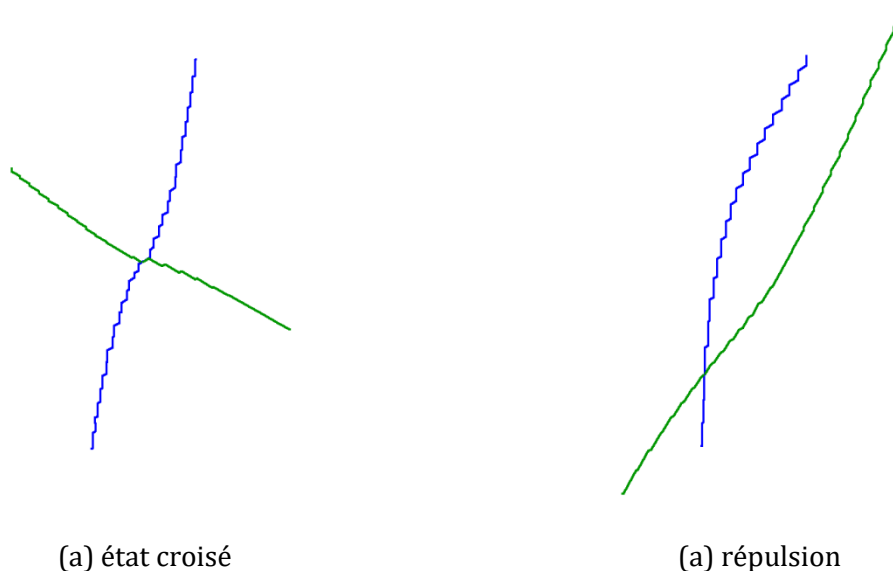


figure 4.10 : Réactions sans formation de jonction illustrées à l'aide de la DD (MobiDiC).

4.4.1.2. Approche analytique

En utilisant la méthode décrite en section 4.2.3, il est possible de prédire analytiquement lorsqu'il y a formation de jonction ou non en utilisant le bilan des tensions de ligne des équations de (4.9) à (4.14). Nous utiliserons ces équations avec les trois cas suivants :

Cas isotrope

Dans l'hypothèse de l'isotropie, les propriétés élastiques sont obtenues en utilisant un module de cisaillement μ et un coefficient de poisson ν identiques quel que soit le type de système dans les équations du bilan d'énergie de ligne. Le paramètre $\mu = \sqrt{\frac{C_{44}(C_{11}-C_{12})}{2}}$ pour un matériau cubique et ν est la moyenne des coefficients ν_{BS} (équation (4.16)) des systèmes des dislocations parentes : $\nu = \frac{\nu_{BS1} + \nu_{BS2}}{2}$.

Cas avec approximation de Bacon-Scattergood

On calcule une valeur de μ et ν pour chaque type de système de glissement et pour chaque jonction formée avec les équations (4.15) et (4.16), c'est-à-dire selon la méthode proposée par Bacon-Scattergood pour prendre en compte l'anisotropie élastique (voir tableau 4.1).

Cas complètement anisotrope

Au lieu d'utiliser la forme isotrope de l'énergie de ligne (4.11), on utilise les valeurs de d'énergie anisotrope et de tension calculées par DisDi et présentées en section 4.2.4.

Les résultats dans la colonne de gauche sur la figure 4.11 sont typiques d'une cartographie analytique (par opposition à celle que l'on peut obtenir par simulation de la DD). Les traits formants des lobes délimitent les zones à l'intérieur desquels il y a formation de jonctions pour les différents cas (isotrope, Bacon-Scattergood et anisotrope). Notons que les portions de lobes aux quatre coins de la cartographie correspondent à quatre portions du lobe central translatées par opération d'inversion globale de la circulation des lignes ($\phi \pm \pi$). Sur ces cartographies, les traits rouges représentent le cas anisotrope, les traits en pointillés le cas isotrope et les traits en bleu l'approximation de Bacon-Scattergood.

À l'extérieur des lobes, les traits verts délimitent les états croisés des états répulsifs. Cela est calculé à partir de la force d'interaction (approximation isotrope) entre deux segments rigides et infinis, introduite par [Kroupa \(1961\)](#).

Enfin, les lignes droites en gris et violet, qui traversent la figure, représentent respectivement les orientations pour lesquelles les dislocations sont coins et vis afin de pouvoir estimer qualitativement l'effet d'une mobilité anisotrope sur les coefficients.

4.4.1.3. Approche avec DD

Bien que l'approche analytique soit efficace, elle ne permet pas de rendre compte de tous les mécanismes en particulier car les lignes sont flexibles et qu'en se courbant deux lignes initialement répulsives peuvent devenir attractives [Kubin et al. (2003)]. Ainsi, l'approche est plus réaliste lorsque l'on considère le résultat d'une simulation de la DD pour chaque couple d'angles. Dans le cas de la DD nous pouvons faire les simulations soit en élasticité complètement anisotrope soit en élasticité isotrope avec un seul jeu de μ et ν ce qui fait que l'approximation de Bacon-Scattergood n'est parfaitement applicable qu'aux cristallographies avec un seul type de système de glissement typiquement les CFC ou quand les couples (μ, ν) obtenus sont proches pour les différents types de systèmes de la cristallographie comme pour les CC.

Les résultats dans les colonnes du milieu et de droite sur la figure 4.11(b) représentent des cartographies de DD superposée aux cartographies analytiques. Les points bleus sont les orientations pour lesquelles il y a formation de jonction, les points verts les états croisés et les points rouges les cas répulsifs.

4.4.1.4. Résultats des cartographies

Les résultats de cartographie sont présentés de la figure 4.11 à la figure 4.13. Ils représentent 5 types de coefficients dont les caractéristiques sont décrites en tableau 4.4. On cherche à analyser l'impact de l'utilisation de l'élasticité isotrope pour les calculs de DD. Nous avons choisi des cartographies représentatives des coefficients de jonctions de type Lomer, glissile, et deux Hirth, une qui ne forme pas de jonction et une autre qui en forme et enfin le cas de l'interaction/annihilation colinéaire a aussi été considéré.

Comme l'a souligné Loridon (2016), l'effet de l'anisotropie est plus marqué sur la jonction de Hirth (celle des CFC induit la formation de jonctions en figure 4.11(d)) que sur les jonctions de Lomer et glissiles pour lesquelles le gain d'énergie n'est pas dû uniquement à des effets angulaires comme pour la jonction de Hirth mais aussi à un gain provenant de la recombinaison favorable des vecteurs de Burgers (voir équations (4.9) à (4.14)). En effet, les lobes des cartographies analytiques sur la figure 4.11 sont très proches pour les jonctions de Lomer et glissile que ce soit en isotrope, en Bacon-Scattergood ou en anisotrope. Par contre, le lobe sur les cartographies analytiques de la jonction de Hirth est plus faible pour l'isotrope que pour l'anisotrope et l'approximation de Bacon-Scattergood surestime le lobe de l'anisotrope.

tableau 4.4 : Caractéristiques des réactions associées aux cartographies

	Lomer (coefficient 11)			glissile (coefficient 5)		
bras	1	2	jonction	1	2	jonction
Système	$\frac{1}{2}[011](0\bar{1}1)$	$\frac{1}{2}[101](\bar{1}01)$	$\frac{1}{2}[1\bar{1}0](\bar{1}\bar{1}2)$	$\frac{1}{2}[011](\bar{1}00)$	$\frac{1}{2}[\bar{1}0\bar{1}](\bar{1}01)$	$\frac{1}{2}[1\bar{1}0](001)$
ν	0,32	0,32	0,25	0,25	0,32	0,25
μ (GPa)	72,7					

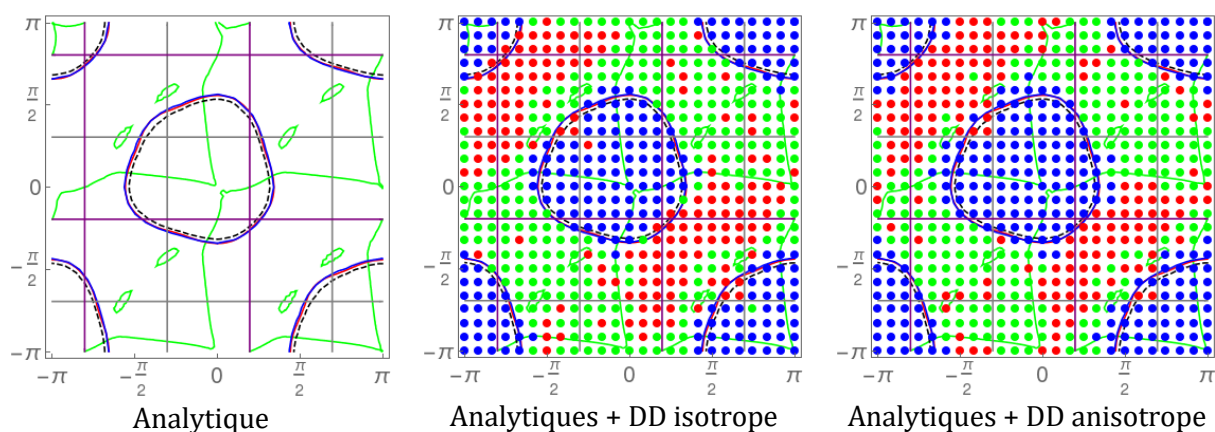
	Hirth sans jonctions (coefficient 4)			Hirth avec jonction (coefficient 17)		
Bras	1	2	j	1	2	j
Système	$\frac{1}{2}[011](100)$	$\frac{1}{2}[01\bar{1}](011)$	$[010](100)$	$\frac{1}{2}[011](11\bar{1})$	$\frac{1}{2}[011](11\bar{1})$	$[001](010)$
ν	0,25	0,32	0,48	0,29	0,29	0,48
μ (GPa)	72,7		55,7	72,7		55,7

	colinéaire (coefficient 3)		
Bras	1	2	-
Système	$\frac{1}{2}[011](100)$	$\frac{1}{2}[101](01\bar{1})$	-
ν	0,25	0,32	-
μ (GPa)	72,7		-

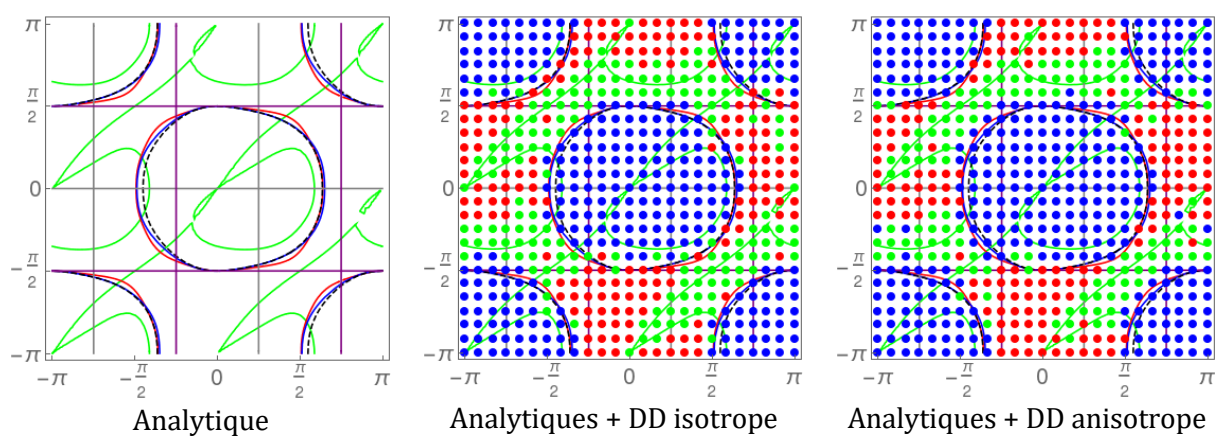
Les résultats obtenus par DD sont très proches des lobes calculés analytiquement que ce soit en isotrope ou en anisotrope mais ce qui est le plus remarquable c'est que les résultats isotrope et anisotrope sont très proches. Ceci est surtout vrai pour les jonctions de Lomer et glissile. Pour la jonction de Hirth, le lobe est très légèrement plus gros en anisotrope qu'en isotrope. L'ordon a évalué la différence de valeur de coefficient pour des cas isotrope et anisotrope sur le cuivre qui apparaît être plus anisotrope que l' UO_2 . Bien que le calcul anisotrope n'ait pas été mené aussi loin que l'isotrope, les valeurs du coefficient pour la jonction glissile en isotrope et anisotrope sont très proches et varient de seulement 7% pour la jonction de Hirth. Notre matériau étant moins anisotrope, la variation du coefficient pour cette dernière jonction devrait être encore moins élevée.

Dans l' UO_2 , seule la jonction Hirth, présentée en figure 4.11(c), forme des jonctions. Toutes les autres jonctions, données dans le tableau 4.3, n'en forment pas comme le montre l'exemple de la figure 4.12. Dans ce cas, aucun lobe n'apparaît que ce soit en analytique comme en DD. En revanche, la DD montre que des jonctions très courtes se forment, mais celles-ci n'induisent a priori pas un ancrage important.

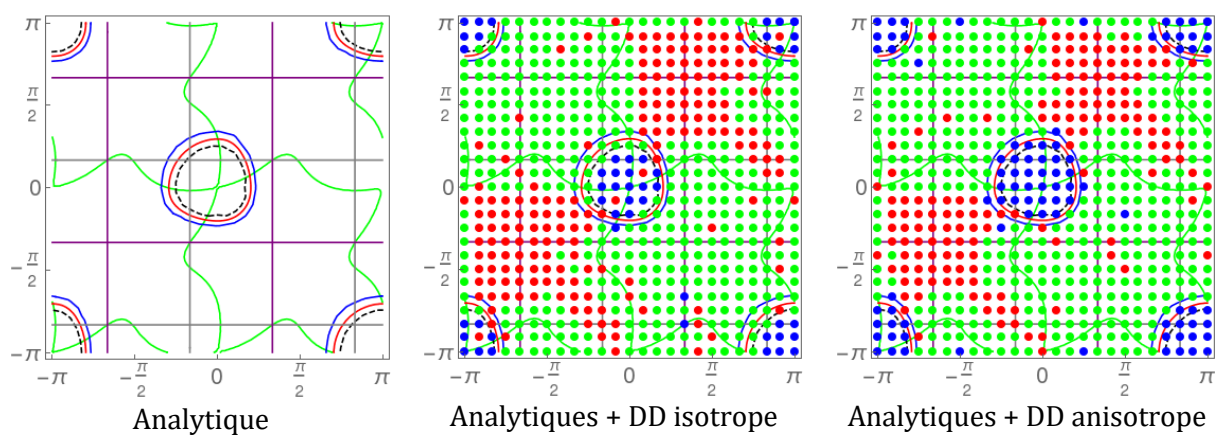
Concernant, l'interaction colinéaire, il faut non pas considérer les lobes (car ils englobent toute la cartographie) mais les zones attractives et répulsives. De plus, les résultats s'écartent plus des prédictions analytiques (qui conduisent toujours à 50% d'attractions et 50% de répulsions). Comme déjà indiqué les lignes sont flexibles et cela permet aux dislocations d'atteindre des taux de recombinaison supérieurs à 70% dans le cas de l'interaction colinéaire. En effet les lignes initialement répulsives se courbent et deviennent attractives.



(a) Jonction de Lomer (associée au coefficient 11)



(b) Jonction glissile (associée au coefficient 5)



(c) Jonction de Hirth avec recombinaisons (associée au coefficient 17)

figure 4.11 : Cartographies des coefficients qui forment des jonctions – En traits rouge le lobe en anisotrope, en pointillés en isotrope et en traits en bleu celui avec l'approximation de Bacon-Scattergood - En trait vert la frontière attractif/répulsif, en gris les directions coins et en violet les directions vis - Enfin les points bleus correspondent aux recombinaisons, les verts au cas attractif et les rouges aux répulsions.

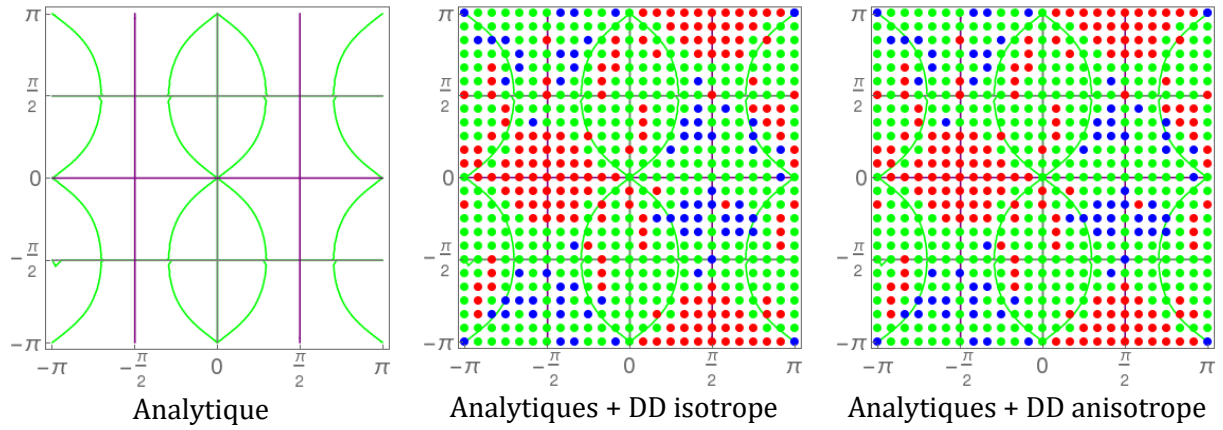


figure 4.12 : Cartographies de la jonction Hirth sans recombinaisons (associée au coefficient 4) – il n’y a pas de lobe en anisotrope ni en isotrope - En trait vert la frontière attractif/répulsif, en gris les directions coins et en violet les directions vis - Enfin les points bleus correspondent aux recombinaisons, les verts au cas attractif et les rouges aux répulsions.

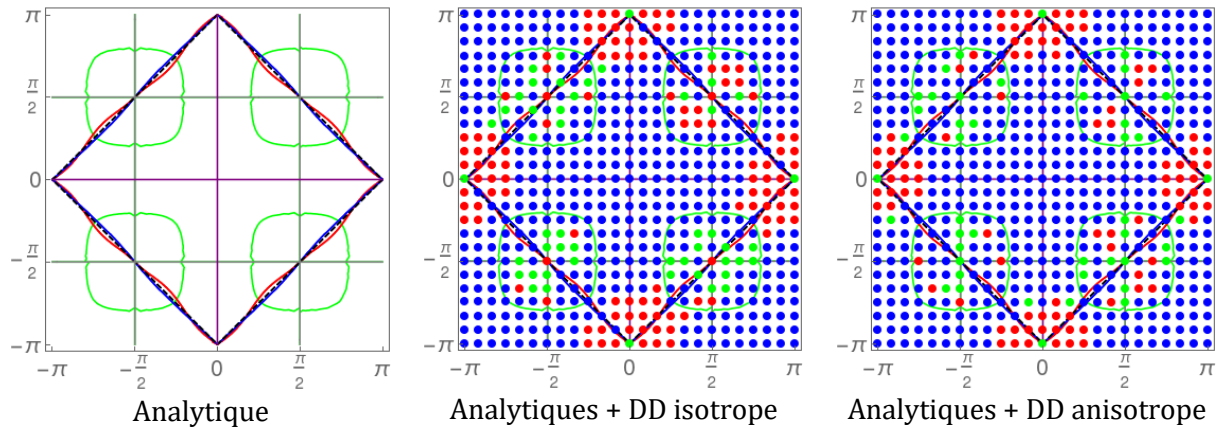


figure 4.13 : Cartographies de l’annihilation colinéaire (coefficient 3) – en traits rouge le lobe en anisotrope, en pointillés celui en isotrope et en traits en bleu avec l’approximation de Bacon-Scattergood - En trait vert la frontière attractif/répulsif, en gris les directions coins et en violet les directions vis - Enfin les points bleus correspondent aux recombinaisons, les verts au cas attractif et les rouges aux répulsions.

Notons que ces cartographies sont en très bon accord avec les résultats sur certaines de ces jonctions qui ont été étudiées par Amodeo dans le MgO [Amodeo (2011), Amodeo et al. (2014)] pour lequel la cristallographie est analogue à l'UO₂ à ceci près que les systèmes du mode {111} ne sont pas considérés.

Finalement on observe une bonne corrélation globale entre probabilité de réaction et gain d'énergie de la réaction, les résultats en élasticité isotrope et anisotrope sont très proches. Bien sûr il n'y a pas de lien direct entre cartographie et coefficient mais l'étude de Loridon montre que l'accord est bon aussi pour les coefficients pour un matériau plus anisotrope que l'UO₂ quand on utilise l'approximation de Bacon-Scattergood, à mi-chemin entre isotrope et anisotrope. Pour cette raison, et compte tenu du nombre élevé de calculs de coefficients à réaliser, on optera pour cette approximation pour le calcul des coefficients dans l'UO₂^{§§}.

4.4.2. Calcul des coefficients

4.4.2.1. Méthode de calcul des coefficients d'interaction de l'UO₂

La DD est la méthode de simulation permettant d'effectuer le passage entre l'échelle des dislocations individuelles à celle de l'échelle du comportement collectif sur un volume suffisamment grand pour avoir une statistique permettant de remonter au comportement du monocristal. Elle permet un calcul direct des coefficients d'interaction [Madec (2001)].

Dans notre cas, nous avons défini un volume de simulation avec des arrêtes de l'ordre de 10 μm . La densité de dislocations utilisée sur le système mobile i est de l'ordre de 10^{11} m^{-2} . Pour cela nous avons positionné dans le volume 12 sources de Frank-Read de 10 μm avec une répartition homogène des caractères. Sous contrainte ces dislocations mobiles vont traverser une forêt de dislocations obstacles appartenant au système j (différent de i) dont la densité initiale est de l'ordre de 10^{12} m^{-2} avec des dislocations de 5 μm (voir l'état initial en figure 4.14(a)).

On applique ensuite une contrainte de manière à avoir une vitesse de déformation de $4,5 \text{ s}^{-1}$ jusqu'à atteindre 0,1 % de déformation plastique (voir état final en figure 4.14(b)) en s'assurant que le système mobile a un fort facteur de Schmid (il est imposé nul pour le système obstacle). Enfin, on calcule la contrainte de cisaillement résolue sur le système mobile au cours de la déformation afin d'identifier la valeur du coefficient en fonction de la déformation par simple inversion la formule de Taylor (équation (4.19)).

^{§§} Le coût de calcul total des coefficients dépasse les 600 000 heures.

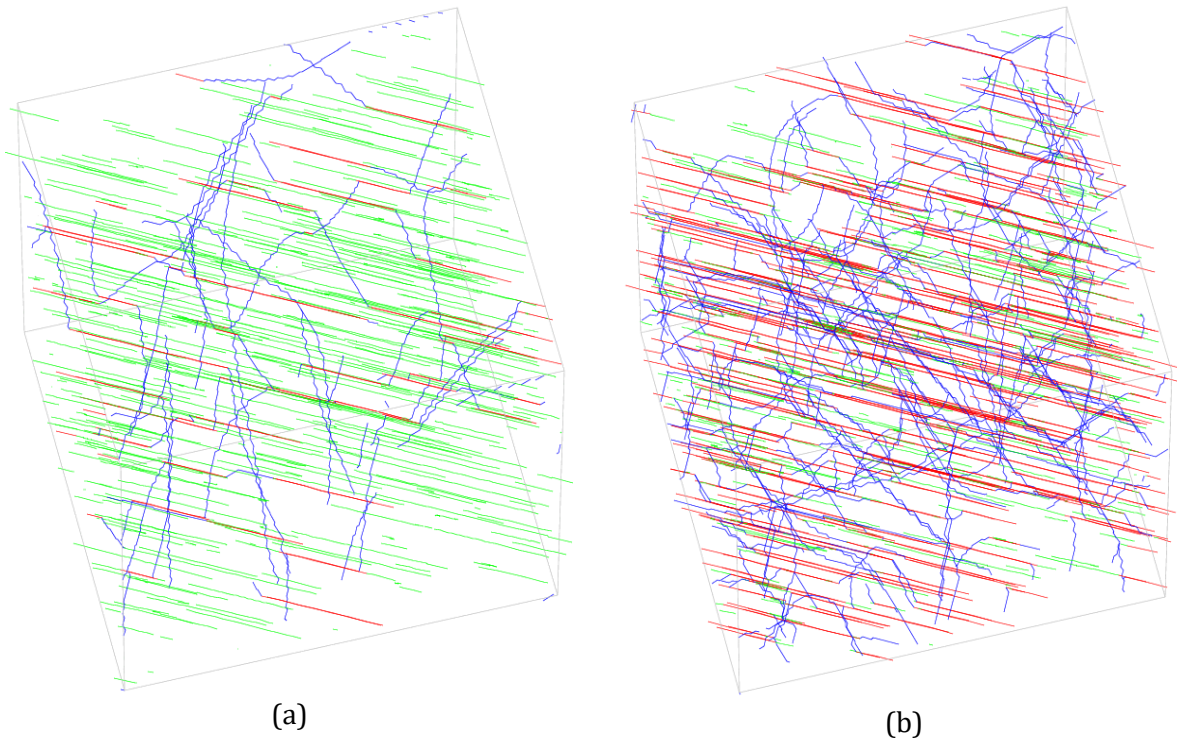
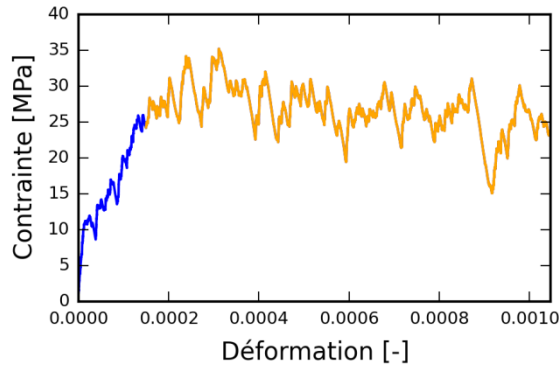


figure 4.14 : Simulation de DD pour le coefficient 2 à 1373 K comportant une densité de dislocations obstacles de 10^{12} m^{-2} , une densité de dislocation mobile de 10^{11} m^{-2} (a) à l'état initial (des jonctions se forment par réactions des deux types de dislocations en l'absence de sollicitation), (b) à l'état final après 0,1% de déformation. Les lignes bleues représentent les dislocations mobiles, les lignes vertes les dislocations obstacles et les lignes rouges les jonctions (la densité de dislocations du système mobile a augmenté d'un ordre de grandeur environ)

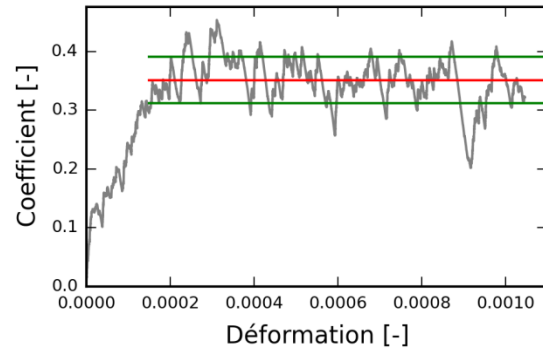
$$\alpha^{ij} = \frac{\tau_c^i}{\mu b \sqrt{\rho^j}} \quad (4.19)$$

La valeur de coefficient retenue est issue de la contrainte d'écoulement moyenne après le régime transitoire en bleu sur la courbe contrainte déformation de la figure 4.15. Notons qu'en inversant la formule de Taylor, nous calculons des coefficients α^{ij} que nous présenterons par la suite. Ainsi, on peut les comparer aisément à la valeur de référence du coefficient α du modèle de la forêt de 0,35 typiquement. Les valeurs de coefficients α^{ij} utilisées dans la formule de Franciosi (équation (4.4)), s'obtiennent en portant au carré les coefficients α^{ij} .

Comme indiqué précédemment en DD isotrope on ne peut utiliser qu'un jeu (μ, ν) . Concernant μ il ne varie pas en fonction du système considéré pour l' UO_2 quand on utilise l'approximation de Bacon-Scattergood, cependant ν varie légèrement dans avec cette approximation. Pour décrire au mieux la tension de ligne du système sous contrainte on décide de choisir le coefficient de Poisson effectif ν du système mobile utilisé pour les calculs de coefficient.



(a) Valeur de la contrainte du système mobile en fonction du cisaillement



(b) Valeur instantanée (en gris), moyenne (en rouge avec écart type correspondant en vert) du coefficient au cours de la déformation.

figure 4.15 : Extraction de la valeur du coefficient d'interaction 2 à 1373 K à partir de la contrainte et de l'équation de Taylor (4.1). La densité de forêt retenue pour le calcul est celle de référence au début de la simulation (cette dernière baisse légèrement lors de la formation de jonctions)

Choix des densités

La valeur des coefficients d'interaction, comme celle du coefficient α n'est pas parfaitement constante et diminue lorsque la densité de dislocations obstacles augmente [Basinski et Basinski (1979)]. La déviation des coefficients obtenue en DD dans les CFC et CC est en très bon accord avec la forme analytique logarithmique attendue voir [Madec et Kubin (2017)]. Ainsi une mesure de coefficient à une seule densité suffit. On choisit tout de même un ordre de grandeur en accord avec les densités de dislocations observées dans la littérature pour l' UO_2 [Yust et McHargue (1969)] qui sont entre 10^{10} m^{-2} et 10^{14} m^{-2} . Ceci nous incite à conserver la valeur classique de 10^{12} m^{-2} pour la densité de dislocations obstacles, ici parfaitement au milieu de la plage des densités observées.

Dans le modèle de la forêt, la densité de dislocations mobiles n'intervient pas. On peut s'assurer que l'on déforme suffisamment lentement pour que la densité de dislocations mobiles initiales puisse fournir la déformation imposée et s'assurer en même temps que la loi de vitesse utilisée n'influence pas le calcul des coefficients d'interaction. À l'aide de la loi d'Orowan donnée en équation (3.18) page 47 et de la loi de vitesse de la DD (équation (2.12) page 30) on estime l'effet de la vitesse de déformation sur la contrainte avec la densité de dislocations de 10^{11} m^{-2} pour le système mobile :

$$\tau = \frac{\dot{\gamma} B}{\rho_m b^2} = \frac{(4,5/0,5) \times 1,5 \cdot 10^{-5}}{10^{11} \times \left(\frac{5,47 \cdot 10^{-10}}{\sqrt{2}} \right)^2} = 9 \cdot 10^3 \text{ Pa} \approx 10^{-2} \text{ MPa}$$

Ensuite, nous comparons cette contrainte à celle produit par son interaction avec une forêt de 10^{12} m^{-2} et avec la plus faible valeur de coefficient d'interaction mesuré, c'est-à-dire la jonction de Hirth (voir les résultats de coefficient dans la section 4.4.2.2) :

$$\tau_f = \alpha \mu b \sqrt{\rho_f} = 0,1 \times 72,7.10^9 \times \left(\frac{5,47.10^{-10}}{\sqrt{2}} \right) \times \sqrt{10^{12}} = 2.7 \text{ MPa}$$

Avec une densité de dislocations mobiles initiale dix fois plus faible que la densité obstacle, la contrainte liée à la mobilité de la dislocation est de l'ordre de 10^2 fois plus faible que celle due à la forêt. On peut donc conclure que la contrainte pour bouger les dislocations n'intervient pas dans le calcul du coefficient d'interaction.

Artefact de simulation

Au cours de la simulation, il faut éviter autant que possible tout artefact de calcul [Madec et al. (2004)] qui pourrait perturber la mesure de la contrainte. Le principal problème rencontré en DD est l'annihilation artificielle d'une dislocation avec son image^{***} ou auto-annihilation quand on utilise des CLPs. Cela est flagrant dès que le système de glissement est perpendiculaire à une face du volume (voir exemple en figure 4.16) mais arrive également très rapidement pour les plans denses si on utilise un volume cubique. Un autre problème est celui des auto-interactions dipolaires artificielles lorsqu'une dislocation se retrouve dans un plan très proche de l'initial via le jeu des CLPs.

Pour éviter l'annihilation dès la première traversée de la boîte une solution consiste à tourner le repère cristallin pour ne plus avoir de plan de glissement perpendiculaire à une face du volume puis à déformer ce volume pour assurer un grand nombre de changement de plan avant de repasser par le plan initial. Pour cela on tourne la base de vecteurs du code de DD et on utilise un code dédié pour optimiser la forme du volume simulé. Ces optimisations éloignent le risque majeur que constitue l'auto-annihilation mais accentue l'effet des auto-interactions dipolaires. Ce dernier reste heureusement peu important comme cela a été testé lors des études antérieures en supprimant les auto-interactions entre segments d'un même système mais de plan différent du calcul des contraintes entre segments.

^{***} En utilisant les CLPs, le volume élémentaire est reconstitué dans toutes les directions $\vec{x}$, $\vec{y}$ et $\vec{z}$ par translation. Ainsi, lorsqu'une dislocation est présente dans le volume, la même dislocation est présente dans tous les volumes images.

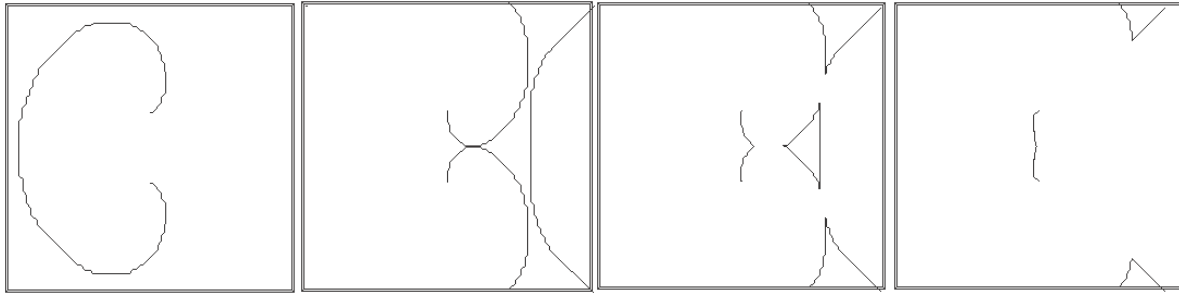


figure 4.16 : Boucle de Frank-Read dont le plan de glissement est perpendiculaire à une face du volume (image d'après [Madec \(2001\)](#)). La boucle s'annihile avec son image à cause des CLPs.

En raison des symétries cristallographiques, pour le calcul de l'ensemble des coefficients il est suffisant de ne considérer qu'un seul système mobile par mode de glissement ce qui conduit pour l' UO_2 à optimiser 3 volumes simulés (un pour chaque mode). De ce fait, nous avons choisi les systèmes $\frac{1}{2}[011](100)$, $\frac{1}{2}[011](0\bar{1}1)$ et $\frac{1}{2}[\bar{1}01](111)$. Le tableau 4.5 résume la géométrie du volume avec les bases de vecteurs choisies pour le glissement sur les systèmes précédemment cités données en Annexe D. Notons que pour le mode $\{111\}$ aucun système n'est initialement orthogonal aux faces du volume donc aucune rotation de la base de vecteur n'a été effectuée. Seule une optimisation de la géométrie parallélépipédique du volume simulé est nécessaire.

Pour illustrer l'efficacité de ces choix, la figure 4.17 montre le volume « déplié » suivant le plan de glissement des dislocations mobiles (appelé également plan étendu) pour le coefficient 2. Après 0,1% de déformation, les boucles de dislocations mobiles émises par les sources ont évolué et grandi sans auto-annihilations. On note que la position des sources est elle aussi optimisée pour éviter des annihilations. Enfin on remarque que les sources peuvent se développer sur l'équivalent d'une dizaine de taille de boîte lors d'un calcul de coefficient.

tableau 4.5 : Détails de la géométrie du volume simulé pour les systèmes mobiles $\frac{1}{2}[011](100)$, $\frac{1}{2}[011](0\bar{1}1)$ et $\frac{1}{2}[\bar{1}01](111)$.

Système mobile	$[011](100)$	$[011](0\bar{1}1)$	$[\bar{1}01](111)$
Après rotation	$[\bar{4} \ 11 \ 5](\bar{1}48)$	$[\bar{4} \ 11 \ 5](12 \ 3 \ 3)$	$[\bar{6}06](666)$
Géométrie du volume simulé	$L_x = 10,5 \text{ } \mu\text{m}$ $L_y = 10 \text{ } \mu\text{m}$ $L_z = 11,82 \text{ } \mu\text{m}$	$L_x = 10 \text{ } \mu\text{m}$ $L_y = 11,38 \text{ } \mu\text{m}$ $L_z = 12,32 \text{ } \mu\text{m}$	$L_x = 10 \text{ } \mu\text{m}$ $L_y = 11,06 \text{ } \mu\text{m}$ $L_z = 613,29 \text{ } \mu\text{m}$
Distance d'auto-annihilation (en taille de boîte)	Min 10,8568 Max 15,9484	Min 7,6270 Max 11,4647	Min 7,6153 Max 12,2408



figure 4.17 : Volume de simulation du coefficient 2 « déplié » suivant le plan de glissement du système mobile (segments en bleu) de normale $(\bar{1}\bar{4}8)$. Les points verts représentent les dislocations obstacles qui traversent le plan de glissement et les jonctions sont tracées en rouge. Les points d'ancrage des sources sont éloignés de $10\text{ }\mu\text{m}$ ce qui permet de juger de l'efficacité de l'optimisation. Le côté du volume déplié est d'environ $250\text{ }\mu\text{m}$ de côté.

4.4.2.2. Résultats de calcul de coefficients

Les valeurs de coefficients, données sur la figure 4.18, varient très peu avec la température et peuvent être classés en trois plages de valeurs en fonction du type de jonction.

Le coefficient le plus fort est de loin celui des annihilations colinéaires avec des valeurs supérieures à 0,6. Ensuite, tous les coefficients impliquant des jonctions de type Lomer ou glissile ont une valeur assez forte entre 0,2 et 0,45. Enfin tous les coefficients de type Hirth ont des valeurs inférieures à 0,2.

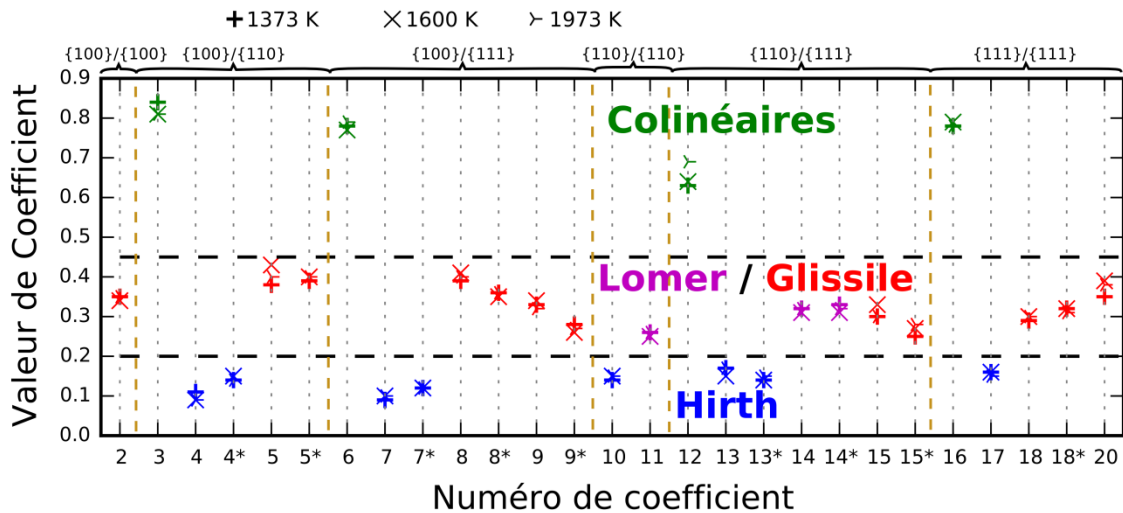


figure 4.18 : Valeurs des coefficients d'interactions de l' UO_2 pour les températures de 1373 K, 1600 K et 1973 K. La matrice relatant l'ensemble des interactions est donnée en tableau 4.2 et les détails des coefficients sont donnés dans le tableau 4.3.

Notons que les valeurs de coefficients de ces 3 grandes catégories sont cohérentes avec les probabilités de formation de jonctions obtenues par les cartographies de la section 4.4.1. La probabilité de formation est donc un facteur important pour les valeurs des coefficients. Le second facteur est la résistance des recombinaisons sous contrainte et il est fortement lié à l'efficacité de la minimisation de l'énergie de ligne (comme le premier) via la réduction de longueur de ligne induite et en particulier pour les segments résiduels des dislocations parentes après réaction. De ce point de vue la jonction de Hirth est assez peu efficace puisqu'en première approximation (si on ne considère que la dépendance en b^2 de l'énergie) elle ne réduit pas l'énergie^{†††} tandis que les jonctions de Lomer et glissile induisent un gain d'énergie d'environ 50% mais évidemment le gain d'énergie le plus fort est associé à l'annihilation colinéaire.

Les valeurs très fortes des coefficients colinéaires sont donc dues autant à la très forte probabilité de réaction qu'à l'extrême réduction de la longueur des brins de dislocation résiduels après annihilation qui sont durs à remobiliser sous contrainte.

Pour toutes les autres jonctions, les bras de jonctions se courbent sous contrainte et dézippent la jonction (voir figure 4.6). Lors du dézippage la distance entre les points d'ancrage augmente, faisant diminuer la contrainte critique d'expansion du segment de dislocation (voir équation (4.2)). Comme les bras se courbent davantage au fur et à mesure que la contrainte augmente, l'équilibre des tensions de ligne au nœud triple change et ce dernier coulisse sur l'axe entraînant le dézippage.

^{†††} En effet les vecteurs de Burgers sont orthogonaux pour la Hirth et $b_j^2 = b_1^2 + b_2^2$, la réduction d'énergie qui explique la formation de ces jonctions provient alors exclusivement de la dépendance d'orientation des lignes dans l'énergie. Pour les jonctions de Lomer et glissile les vecteurs de Burgers sont à $\pi/3$ et on a $b_j^2 = b_1^2 = b_2^2 < b_1^2 + b_2^2$ avec un gain d'énergie important sans même considérer l'effet angulaire, pour l'interaction colinéaire $b_j^2 = 0$.

La situation est souvent assez différente dans le cas des réactions colinéaires. Si le nœud double peut là aussi coulisser sur l'axe et induire un mécanisme proche de celui du dézippage d'une jonction, on a le plus souvent à faire à un mécanisme de source⁺⁺⁺. En d'autres termes souvent le nœud coulisse moins facilement que le segment se courbe pour émettre une boucle. La « microstructure colinéaire » fait apparaître beaucoup de petits segments de dislocations en raison de la forte probabilité de réaction et de la grande réduction de ligne induite qui sont donc autant de sources à remobiliser. Comme ils sont beaucoup plus petits que les bras de jonctions pour une même densité de forêt il induisent une contrainte d'écoulement bien plus forte.

À l'intérieur d'une même catégorie de jonctions, différentes valeurs de coefficients sont obtenues. On observe approximativement un facteur 2 entre les jonctions les plus faibles et les plus fortes d'une catégorie sauf dans le cas de l'interaction colinéaire pour laquelle la variation est plutôt de l'ordre de 50%. Il existe trois facteurs importants pouvant influencer la valeur des coefficients :

- (i) Plus le bilan d'énergie, $\Delta E = |E_j - (E_1 + E_2)|$, est grand plus le coefficient est fort (E_i est donné par les équations (4.11) et (4.12)). C'est typiquement ce que montrent les cartographies.
- (ii) Si les jonctions se forment selon la direction vis du système mobile, les lignes mobiles ont tendance à s'allonger dans cette direction où la tension de ligne associée est maximale et d'autant plus forte que v est grand.
- (iii) Plus l'angle entre les plans des dislocations parentes, que nous appellerons β_{12} , est proche de 90° , plus le coefficient a tendance à être fort. L'angle joue sur la probabilité de croisement des dislocations.

L'analyse des valeurs des coefficients est donnée sur les tableaux de 4.6 à 4.8. Ayant énoncé les principes nous ne détaillerons pas dans le texte les résultats mais nous avons proposé dans ces tableaux une analyse didactique pour le lecteur en ciblant les causes de variation de valeur d'un coefficient à l'autre. Lorsque la cause est donnée par le facteur (i) la couleur rouge est utilisée, pour le facteur (ii) le vert et pour le facteur (iii) le bleu. Notons que parfois il peut y avoir plusieurs causes.

Globalement le gain d'énergie (facteur (i)), qui permet de distinguer les 3 grandes catégories, continue à jouer un rôle important sauf dans le cas par exemple des interactions colinéaires puisqu'il est le même quel que soit l'annihilation considérée. La cause de la variation des coefficients colinéaires est alors due principalement à l'angle entre les plans des dislocations parentes (facteur (iii)) qui joue aussi pour les jonctions mais de concert avec les autres facteurs. Pour les jonctions asymétriques, on observe parfois une variation du bilan d'énergie de ligne, il est dû à notre approche à un seul coefficient de Poisson effectif pour l'approximation de Bacon-Scattergood. Pour mémoire, même si on a utilisé l'élasticité isotrope pour le calcul des coefficients, on a

⁺⁺⁺ Laurent Dupuy communication privée.

retenu la valeur du système mobile pour bien décrire les effets de tension de ligne en DD. Par conséquent pour une même jonction le gain d'énergie change quand on inverse le rôle des systèmes mobiles et obstacle car on modifie la valeur de v . Mais c'est surtout l'effet durcissant de la tension de ligne quand les dislocations sont proches d'un caractère vis (facteur (ii)) qui explique principalement la valeur relative des coefficients asymétriques entre eux. Cela a été montré par [Madec et Kubin \(2017\)](#) notamment pour les jonctions glissiles des CFC qui correspondent à notre coefficient 18 entre systèmes de mode {111}.

4.4.3. Conclusions

On a calculé les coefficients d'interaction pour l' UO_2 à 3 températures différentes, représentatives de la plage de fonctionnement des réacteurs, en utilisant l'approximation de Bacon-Scattergood à mi-chemin entre élasticité isotrope et anisotrope. On observe d'une part que le coefficient de Poisson effectif et les coefficients d'interaction varient peu en fonction de la température, et d'autre part que le matériau est peu anisotrope. On retrouve pour les coefficients les grandes catégories déjà bien identifiées pour le CFC de force croissante qui résultent des différences de gain d'énergie lors de la recombinaison des vecteurs de Burgers, jonctions faibles (Hirth), fortes (Lomer et glissiles) et interaction colinéaire. En raison du nombre de coefficients important (plus grand encore que pour les CC) on note à l'intérieur de chaque catégorie des variations importantes de la valeur des coefficients pilotées cette fois exclusivement par l'angle entre les plans de glissement pour l'interaction colinéaire et surtout par l'effet de l'orientation des dislocations sur l'énergie élastique pour les jonctions.

tableau 4.6 : Valeur des coefficients de Hirth classés par ordre croissant, on précise l'énergétique associée (en rouge si c'est le facteur dominant), l'angle entre les plans des dislocations parentes (en bleu) et les angles d'intérêt dont celui qui influe sur la tension de ligne des dislocations du système mobile (en vert).

Hirth	Ordre des coefficients									Coefficients asymétrique											
Numéro Coefficient	7		4		13*		10		17	7		7*		4		4*		13*		13	
Valeur	0,09	<	0,11	<	0,14	<	0,14	<	0,16	0,09	<	0,12		0,11	<	0,14		0,11	<	0,17	
β_{12} (°)	57	<	90	=	90	=	90	>	70	55	=	55		90	=	90		90	=	90	
v	0,25	=	0,25	<	0,29	<	0,32	>	0,29	0,25	<	0,29		0,25	<	0,32		0,29	<	0,32	
ΔE (10 ⁷ N/m)	2,3	=	2,3	<	2,4	<	2,5	>	2,4	2,3	<	2,4		2,3	<	2,5		2,4	<	2,5	
β_i (°)	45	=	45	<	66	<	90	>	45	45	=	45		45	=	45		66	=	66	
β_1 (°)	90	=	90	<	90	<	90	>	60	90	>	0		90	>	0		90	>	55	
β_2 (°)	0		0	<	55	<	90	>	60	0	<	90		0	<	90		55	<	90	

tableau 4.7 : Analyse des coefficients de Lomer et glissile classés par ordre croissant, on précise l'énergétique associée (en rouge si c'est le facteur dominant), l'angle entre les plans des dislocations parentes (en bleu) et les angles d'intérêt dont celui qui influe sur la tension de ligne des dislocations du système mobile (en vert).

Ordre des coefficients Lomer-glissile																	
Numéro Coefficient	11		18		15		14		9		20		2		5		8
Valeur	0,26	<	0,29	<	0,3	<	0,32	<	0,33	<	0,35	≤	0,35	<	0,38	<	0,39
β ₁₂ (°)	60	<	70	>	35	<	90	>	55	<	70	<	90	>	45	<	55
ν	0,32	>	0,29	<	0,32	=	0,32	>	0,25	<	0,29	>	0,25	=	0,25	=	0,25
ΔE (10 ⁷ N/m)	2	<	2,9	=	2,9	>	2,7	<	2,9	=	2,9	>	2,5	<	3,9	=	3,9
β _i (°)	90	>	60	=	60	<	73	>	60	<	90	=	90	>	45	<	60
β ₁ (°)	35	<	60	>	0	<	55	>	0	<	60	>	45	<	45	<	90
β ₂ (°)	35	<	0	<	60	<	30	>	60	<	60	>	45	<	90	<	60

Coefficients asymétriques																							
Numéro Coefficient	5		5*		8		8*		9		9*		15		15*		14		14*		18		18*
Valeur	0,39	<	0,4		0,39	>	0,36		0,33	>	0,29		0,3	>	0,25		0,32	<	0,33		0,29	<	0,32
β_{12} (°)	45	=	45		55	=	55		55	=	55		35	=	35		90	=	90		70	=	70
ν	0,25	<	0,32		0,25	<	0,29		0,25	<	0,29		0,32	>	0,29		0,32	>	0,29		0,29	=	0,29
ΔE (10 ⁷ N/m)	3,9	<	4,2		3,9	<	4		2,9	=	2,9		2,9	=	2,9		2,7	≤	2,7		2,9	=	2,9
β_i (°)	45	=	45		60	=	60		60	=	60		60	=	60		73	=	73		60	=	60
β_1 (°)	45	=	45		90	>	60		0	<	60		0	<	60		55	>	30		60	>	0
β_2 (°)	90	=	90		60	<	90		60	>	0		60	>	0		30	<	55		0	<	60

tableau 4.8 : Analyse des coefficients colinéaires classés par ordre croissant, on précise l'énergétique associée (en rouge si c'est le facteur dominant) et l'angle entre les plans des dislocations parentes (en bleu)

Numéro Coefficient	12		6		16		3
Valeur	0,63	<	0,78	<	0,78	<	0,84
β_{12} (°)	35	<	55	<	70	<	90
ν	0,32	>	0,25	<	0,29	>	0,25

4.5. Effet de l'interaction des dislocations sur l'écrouissage et l'activation des systèmes de glissement dans l'UO₂

Dans le chapitre 3, nous avons émis l'hypothèse que la prise en compte des interactions entre dislocations pourrait permettre d'améliorer la prédiction de l'anisotropie viscoplastique. Disposant des coefficients de la matrice d'interaction à l'aide de la dynamique des dislocations (voir section 4.4.2), nous pouvons maintenant vérifier cette hypothèse en reprenant les simulations EF des tests de compression sur monocristaux.

4.5.1. Intégration dans le modèle

L'introduction de l'écrouissage résultant des interactions dans le code de plasticité cristalline se fait à l'aide des équations (4.4) et (4.5) qui donnent l'accroissement de la contrainte de cisaillement critique τ_c^s du système s et l'évolution des densités de dislocations au cours du cisaillement de ce système $\frac{\partial \rho^s}{\partial \gamma^s}$. Dans la première équation les coefficients que nous venons de calculer en section 4.4.2.2 interviennent et seuls les termes dipolaires sont à préciser (on utilise des valeurs analogues à celles utilisées pour les CFC voir tableau 4.9). Dans la seconde équation, le libre parcours moyen des dislocations est à définir et c'est l'objet de la section suivante. Enfin on précisera où on intègre l'accroissement de la contrainte de cisaillement critique τ_c^s dans le modèle.

4.5.1.1. Libre parcours moyen

Dans l'équation (4.5) d'évolution des densités de dislocations, le stockage des dislocations est représenté par l'immobilisation des dislocations mobiles après une distance donnée lorsqu'elles rencontrent un obstacle suffisamment fort pour les bloquer. Ainsi, plus il y a d'obstacles et plus ils sont résistants, plus les dislocations s'immobilisent rapidement et plus il y a de stockage. De ce fait, le stockage est inversement proportionnel au libre parcours moyen des dislocations mobiles qui lui-même est inversement proportionnel à la densité d'obstacle, elle-même modulée par leur efficacité. D'après [Devincre et al. \(2008\)](#) et [Kubin et al. \(2008\)](#), le libre parcours moyen dépend de plusieurs paramètres dans lesquels la matrice d'interaction joue une fois de plus un rôle. De manière générale, ils définissent l'inverse du libre parcours moyen du système s par l'équation (4.20). Cette dernière représente la force moyenne de l'interaction entre les systèmes s et u , divisée par un coefficient de stockage K^{su} caractéristique du type d'interaction entre s et u .

$$\frac{1}{L^s} = \sqrt{\sum_u \left(\frac{a^{su}}{K^{su2}} \right) \rho^{su}} \quad (4.20)$$

Lorsque l'interaction entre s et u ne forme pas de jonction, c'est-à-dire pour toutes interactions dipolaires^{§§§}, la valeur de K^{su} est de l'ordre de 150. Dans ce cas précis on nommera ce coefficient : K_I (I faisant référence au stade I des courbes à 3 stades des monocristaux pour lequel ce paramètre joue un rôle important).

À l'inverse, lorsque l'interaction mène à la formation de jonction la valeur de K^{su} dépend du nombre de jonctions et des systèmes se faisant obstacles. Dans une approximation d'activation symétrique du glissement, on note ce coefficient K_{hkl} et il ressort de la comptabilité des jonctions formées que plus il y a de systèmes actifs, plus sa valeur est petite et le stockage fort. Pour calculer K_{hkl} , il est donc nécessaire dans un premier temps de déterminer les systèmes actifs puis, dans un second temps, on détermine sa valeur à partir de l'équation suivante proposée par [Kubin et al. \(2008\)](#) :

$$K_{hkl} = \frac{\sqrt{a}(1 - \kappa)^{3/2} \cdot n}{p_0 \cdot k_0(n - 1 - \kappa)} \quad (4.21)$$

Dans l'équation (4.21), $\sqrt{a}$ représente la valeur moyenne des coefficients entre systèmes actifs obtenue à l'aide des coefficients d'interaction, le coefficient $\kappa = \frac{\rho_{jct}^s}{\rho_0^s} = 0,225$ est le ratio entre la densité de jonctions sur le système ρ_{jct}^s et la densité de dislocations ρ_0^s , et les coefficients $k_0 = 1,08$ et $p_0 = 0,117$ sont des constantes sans dimension associées à la résistance et à la probabilité de formation des jonctions. Notons que les valeurs de ces coefficients, n'ont pas été déterminées spécifiquement pour l'UO₂ mais sont issues de [[Kubin et al. \(2008\)](#)] à l'origine pour les matériaux CFC. Ces paramètres sont modulés par la matrice d'interaction et par nature plus moyennés que les coefficients d'interaction mais on ne peut assurer que les valeurs CFC soient parfaitement adaptées sachant qu'en plus cette approximation n'est valable qu'en régime athermique.

Un autre paramètre méconnu de l'équation (4.5) est la distance d'annihilation. Faute d'avoir des données expérimentales ou de simulations la concernant, on prend une valeur typique issue de la littérature pour le cuivre avec $y_c = 10,8b$. Le choix de cette valeur est moins critique que pour le libre parcours moyen car tant que les déformations simulées restent faibles son rôle est marginal.

^{§§§} Dans l'UO₂ on a des coefficients sans formation de jonction, bien que les plans ne soient pas parallèles et que des dipôles ne puissent en conséquence pas non plus se former et afin de ne pas alourdir le modèle avec un K spécifique pour les états croisés et cas répulsifs on appliquera aussi K_I pour les Hirth sans formation de jonction i.e. sans lobe.

4.5.1.2. Intégration de la contrainte de cisaillement critique dans le modèle

De manière générale, les modèles dans le régime athermique de type CFC, intègrent la contrainte critique τ_c^s de l'équation (4.4) comme le diviseur de la contrainte de cisaillement résolue τ^s : τ^s/τ_c^s (voir par exemple [Dequiedt et al. (2015)]). D'un autre côté, pour les lois thermiquement activées, ce terme est introduit en soustraction à τ^s car le dénominateur représente la contrainte de Peierls [Kocks et al. (1975)]. Cependant, Fivel et Forest (2004) intègrent cette contrainte critique dans une loi thermiquement activée semi-empirique au dénominateur mélangeant les deux points précédents. Finalement, Soulacroix (2014) a proposé d'intégrer les effets d'écrouissage forêt avec le modèle en cosinus hyperbolique présenté précédemment (équation (3.25) page 48) dans un terme exponentiel multiplié au cosinus hyperbolique. Il nous faut alors déterminer quelle est la meilleure solution pour notre modèle empirique.

L'équation suivante décrit la vitesse de cisaillement en intégrant l'écrouissage par interactions au dénominateur du cosinus hyperbolique.

$$\dot{\gamma} = \rho_m b^2 v_D \exp\left(-\frac{\Delta H_0}{k_b T}\right) \left(\cosh\left(\frac{\tau}{\tau_0 + \tau_c}\right) - 1\right) \text{signe}(\tau^s) \quad (4.22)$$

L'équation (4.23) introduit la contrainte critique au numérateur du cosinus hyperbolique.

$$\dot{\gamma} = \rho_m b^2 v_D \exp\left(-\frac{\Delta H_0}{k_b T}\right) \left(\cosh\left(\frac{\tau - \tau_c}{\tau_0}\right) - 1\right) \text{signe}(\tau^s) \quad (4.23)$$

Finalement, l'équation (4.24) décrit l'intégration de l'écrouissage d'après la proposition de Soulacroix.

$$\dot{\gamma} = \rho_m b^2 v_D \exp\left(-\frac{\Delta H_0}{k_b T}\right) \left(\cosh\left(\frac{\tau}{\tau_0}\right) - 1\right) \exp\left(-\frac{\tau_c}{\tau_0}\right) \text{signe}(\tau^s) \quad (4.24)$$

La figure 4.19 illustre les résultats obtenus avec les différentes équations présentées précédemment, comparés à un résultat sans écrouissage en considérant les simplifications suivantes :

- On ne considère que le premier système du mode {100} dont les paramètres sont donnés dans le tableau 3.4 page 56 et rappelés dans le tableau 4.9.
- La contrainte critique est constante tout au long du chargement et introduite par l'équation (4.4) avec les coefficients donnés dans la section 4.4.2.2 et une densité de dislocations sur chaque système de $\rho^s = 10^{12}/24 \text{ m}^{-2}$ et $\tau_c^1 \approx 8 \text{ MPa}$.
- La contrainte de cisaillement τ est arbitrairement définie évoluant entre 1 et 80 MPa.

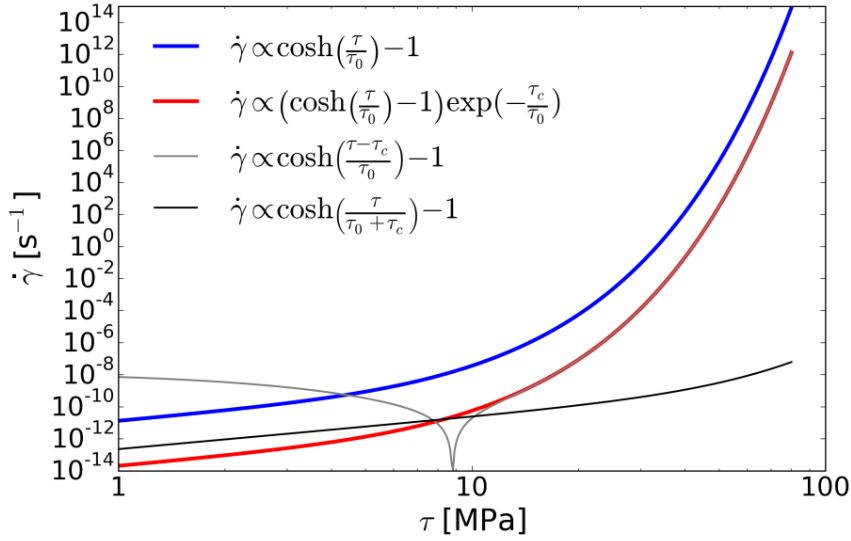


figure 4.19 : Évolution de la vitesse de cisaillement en fonction de la contrainte résolue. La courbe bleue représente un cas sans écrouissage et est donnée en équation (3.25). Les autres courbes concernent les différentes hypothèses d'écrouissage avec en rouge la loi donnée par l'équation (4.24), en gris par l'équation (4.22) et en noir par l'équation (4.23).

La comparaison entre les différentes équations avec écrouissage et le résultat sans écrouissage indique que l'équation (4.24) est plus adaptée dans le cas de notre loi de glissement empirique. En effet, en prenant en compte la contrainte de cisaillement au dénominateur, la vitesse de cisaillement est excessivement réduite avec une densité obstacle pourtant typique. τ_0 ne correspond pas directement à la contrainte de Peierls avec la forme de loi utilisée. Si en plus cette densité augmente au cours de la sollicitation, cela va avoir pour effet de bloquer instantanément les systèmes.

Lorsque τ_c est pris en compte dans le numérateur du cosinus hyperbolique, la courbe en gris montre que pour de fortes contraintes il y a un décalage du seuil en contrainte par rapport au cas sans écrouissage conformément au résultat attendu. Par contre lorsque la contrainte diminue la dépendance de la vitesse à la contrainte n'est plus continue et s'annule à contrainte non nulle lorsque τ est égal à τ_c . De plus, plus la contrainte diminue, plus la vitesse augmente dépassant la vitesse de cisaillement du cas de référence pour atteindre une asymptote non nulle. Ceci n'est donc pas représentatif de la réalité.

Finalement, en prenant en compte l'écrouissage dans une exponentielle comme l'a proposé Soulacroix, cela permet d'avoir un décalage du seuil en contrainte à basses et fortes contraintes. C'est donc la solution que nous avons retenue pour la suite de notre étude.

4.5.1.3. Récapitulatif des équations du modèle avec écrouissage

$$\begin{aligned}
\bar{\sigma} &= \frac{1}{\det(\bar{\mathbf{F}}^e)} \bar{\mathbf{F}}^e \cdot \bar{\pi} \cdot \bar{\mathbf{F}}^e{}^T \\
\bar{\pi} &= \bar{\bar{C}} : \bar{\mathbf{E}}_{GL}^e \\
\bar{\mathbf{F}} &= \bar{\mathbf{F}}^e \cdot \bar{\mathbf{F}}^p \\
\bar{\mathbf{L}}^p &= \dot{\bar{\mathbf{F}}}^p \bar{\mathbf{F}}^p{}^{-1} = \sum_{s=1}^{N_s} \dot{\gamma}^s \cdot \bar{\mu}^s \\
\bar{\mathbf{M}} &= \bar{\mathbf{F}}^e{}^T \cdot \bar{\mathbf{F}}^e \cdot \bar{\pi} \\
\tau^s &= \bar{\bar{M}} : \bar{\mu}^s \\
\bar{\mu}^s &= \bar{\mathbf{b}}^s \otimes \bar{\mathbf{n}}^s \\
\dot{\gamma}^s &= \rho_m^s b^2 v_D \exp\left(-\frac{\Delta H_0^s}{k_b T}\right) \left(\cosh\left(\frac{\tau^s}{\tau_0^s}\right) - 1\right) \exp\left(-\frac{\tau_c^s}{\tau_0^s}\right) \\
\tau_c^s &= \mu b \sqrt{\sum_u a^{su} \rho^u} \\
\dot{\rho}^s &= \frac{1}{b} \left(\sqrt{\sum_u \left(\frac{a^{su}}{K^{su2}}\right) \rho^u} - 2\gamma_c \rho^s \right) |\dot{\gamma}^s|
\end{aligned} \tag{4.25}$$

$K^{su} = K_I = 150$ si l'interaction entre s et u est dipolaire
(en l'absence de formation de jonction l'interaction est assimilée à de l'interaction dipolaire)

$K^{su} = K_{hkl} = \frac{\sqrt{a}(1-\kappa)^{3/2} \cdot n}{p_0 \cdot k_0(n-1-\kappa)}$ si s et u sont deux systèmes avec formation de jonctions

4.5.2. Simulations EF avec écrouissage

4.5.2.1. Choix du modèle et méthode

Dans cette partie de l'étude, nous simulons le comportement du matériau en prenant en compte l'écrouissage dû à l'interaction des dislocations avec les EF. Nous considérons à nouveau les essais de compression sur monocristaux de [Sawbridge et Sykes \(1971\)](#), décrits en section 3.3.1 page 58, afin d'étudier l'effet de l'écrouissage sur l'évolution de la contrainte et de l'activation des systèmes de glissement. En effet, nous avons identifié dans le chapitre 3 que la restitution des résultats d'anisotropie viscoplastique était parfois limitée car le modèle ne permettait pas une modification significative de l'activation des systèmes suivant l'orientation cristalline considérée.

L'activation du mode {111} étant nécessaire pour mieux représenter l'anisotropie viscoplastique, nous utilisons un modèle avec lequel l'activation des systèmes du mode {111} est intermédiaire entre celles des modes {100} et {110}. Pour cela on considère que les paramètres des systèmes $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle\{111\}$ sont égaux à ceux des systèmes $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle\{110\}$ mais avec une contrainte d'activation $\tau_0^{\{111\}} = 3,5$ MPa. Il est important de noter que comparé au cas 3 de l'étude paramétrique réalisée en section 3.3.3.3 page 69, aucune modification des paramètres du mode {100} n'est apportée ici, notons cette série de calculs cas 4. Les paramètres du modèle pour cette étude sont donnés dans le tableau 4.9.

tableau 4.9 : Paramètres du modèle pour l'étude d'écrouissage avec interactions des dislocations.

Paramètre	$\tau_0^{\{100\}}$ (MPa)	$\rho_m^{\{100\}}$ (m^{-2})	$\Delta H_0^{\{100\}}$ (eV)	$\tau_0^{\{110\}}$ (MPa)	$\rho_m^{\{110\}}$ (m^{-2})
Valeur	1,35	$6,2 \cdot 10^{12}$	5,71	4,78	$9,2 \cdot 10^{11}$
Provenance	Section 3.2				

Paramètre	$\Delta H_0^{\{110\}}$ (eV)	$\tau_0^{\{111\}}$ (MPa)	$\rho_m^{\{111\}}$ (m^{-2})	$\Delta H_0^{\{111\}}$ (eV)	b (m)
Valeur	5,22	3,5	$9,2 \cdot 10^{11}$	5,22	$\frac{5,47 \cdot 10^{-10}}{\sqrt{2}}$
Provenance	Section 3.2				

Paramètre	ν_D (s^{-1})	k_B (J/K)	μ (GPa)	a^{su}	
Valeur	$4,94 \times 10^{13}$	$1,38 \cdot 10^{-23}$	$\sqrt{\frac{C_{44}(C_{11} - C_{12})}{2}}$	Voir figure 4.18	
Provenance	Section 3.1		Voir figure 3.16 pour les Cij		

Paramètre	p_0	γ_c	κ	k_0	
Valeur	0,117	$10,8b$	0,225	1,08	
Provenance	Kubin et al. (2008)				

Les résultats d'anisotropie viscoplastique sans écrouissage avec le cas 4 comparés aux mesures de [Sawbridge et Sykes \(1971\)](#) sont résumés sur la figure 3.28 (voir plus de détails en Annexe C). Notons que l'estimation de la contrainte est globalement bonne pour des orientations $\phi > 16^\circ$ que l'on notera zone (I). De plus, l'activation des systèmes est cohérente avec l'expérience. Par contre dans la zone proche de CA = [001] (zone (II)) et celle au centre de la FPI (zone (III)), les contraintes sont sous-estimées et l'activation des systèmes n'est pas conforme à l'expérience. Dans la zone (II), la simulation montre l'activation de systèmes de mode {111} alors que l'expérience montre deux systèmes de mode {110}. Finalement, dans la zone centrale, seuls des systèmes de mode {100} sont actifs alors que le mode {111} devrait participer de manière non négligeable à la déformation.

La stratégie de simulation avec écrouissage est la suivante :

1. Orientation $\phi = 25,5^\circ$ (zone(I)) : Vérification que l'écrouissage ne modifie pas la prédiction de la contrainte et des systèmes actifs. Si c'est le cas, cette orientation

servira de référence pour la calibration du modèle à utiliser sur les autres orientations.

2. Orientation $\phi = 2^\circ$ (zone (II)) : Pour cette orientation certains systèmes susceptibles d'être activés sur les modes $\{100\}$ et $\{111\}$ sont en interaction colinéaire ce qui peut engendrer un fort durcissement. Le résultat idéalement attendu est une désactivation de certains systèmes $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle\{111\}$ au profit des systèmes $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle\{110\}$. L'asymétrie des interactions pourrait aussi favoriser l'activation de deux systèmes $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle\{110\}$ sur les quatre qui ont des facteurs de Schmid proches de 0,5. Nous détaillerons cela plus loin.
3. Orientation $\Omega = 20^\circ$ (zone (III)) : Dans cette zone, les interactions entre les systèmes $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle\{100\}$ sont fortes. Le résultat espéré est une désactivation des systèmes de ce mode favorisant l'activation des systèmes de mode $\{111\}$.

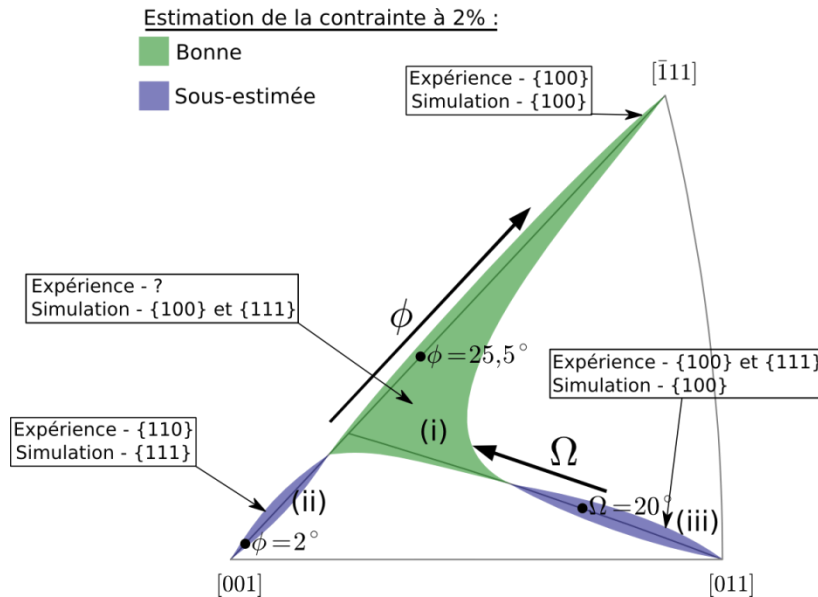


figure 4.20 : Résumé des résultats de la simulation EF de l'anisotropie viscoplastique avec le modèle sans écrouissage (cas 4) dont les paramètres sont décrits dans le tableau 4.9 comparés aux résultats expérimentaux de [Sawbridge et Sykes \(1971\)](#) (Plus de détails en Annexe C).

Pour réaliser cette étude, il est nécessaire de commencer par l'identification des systèmes actifs au cours de la déformation. Pour cela, on lance une simulation de compression jusqu'à 1 ou 2% de déformation dans l'orientation qui nous intéresse. Pour la matrice du libre parcours moyen on utilise la matrice d'interactions à 1600 K et on divise ses coefficients par K_l pour les systèmes associés à la formation de dipôles (ou en l'absence de jonction) et par $K_{hkl} = K_{moy} = 5$ pour les autres coefficients associés aux jonctions (voir tableau 4.10). Une fois les systèmes actifs bien définis, les K_{hkl} sont finalement définis proprement d'après l'équation (4.21).

Afin d'analyser l'activation des différents systèmes, nous avons extrait le pourcentage du cisaillement moyen sur le système considéré par rapport au cisaillement total. Ce dernier est la somme des cisaillements moyens de tous les systèmes. De plus, il est

parfois nécessaire d'analyser localement l'activation des systèmes. Pour cela, nous avons tracé le cisaillement en fin de simulation dans une ligne à mi-hauteur de l'éprouvette traversant le cristal en diagonal.

tableau 4.10 : Tableau récapitulatif des coefficients d'interaction à 1600 K et des coefficients de stockage K par lesquels les coefficients d'interaction sont divisés pour la première série de simulations servant à déterminer les systèmes actifs.

Type d'interaction	Numéro du Coefficient α	Valeur du Coefficient α	division par K_I ou K_{moy}
Auto-écrouissage	α_0	0,352	K_I
Dipolaire	α_1	0,352	K_I
Glissile	α_2	0,354	K_{moy}
Colinéaire	α_3	0,809	K_{moy}
Hirth	α_4	0,095	K_{moy}
Hirth	α_4^*	0,141	K_{moy}
Glissile	α_5	0,405	K_{moy}
Glissile	α_5^*	0,404	K_{moy}
Colinéaire	α_6	0,791	K_{moy}
Hirth	α_7	0,103	K_{moy}
Hirth	α_7^*	0,121	K_{moy}
Glissile	α_8	0,404	K_{moy}
Glissile	α_8^*	0,358	K_{moy}
Glissile	α_9	0,322	K_{moy}
Glissile	α_9^*	0,268	K_{moy}
Hirth	α_{10}	0,152	K_{moy}
Lomer	α_{11}	0,255	K_{moy}
Colinéaire	α_{12}	0,690	K_{moy}
Hirth	α_{13}	0,168	K_{moy}
Hirth	α_{13}^*	0,147	K_{moy}
Lomer	α_{14}	0,320	K_{moy}
Lomer	α_{14}^*	0,317	K_{moy}
Glissile	α_{15}	0,303	K_{moy}
Glissile	α_{15}^*	0,278	K_{moy}
Colinéaire	α_{16}	0,783	K_{moy}
Hirth	α_{17}	0,154	K_{moy}
Glissile	α_{18}	0,297	K_{moy}
Glissile	α_{18}^*	0,309	K_{moy}
Dipolaire	α_{19}	0,352	K_I
Glissile	α_{20}	0,381	K_{moy}

4.5.2.2. Résultats de simulation EF avec écrouissage

Dans ce qui suit, nous avons nommé les indices « SE » et « AE » pour désigner respectivement les termes « Sans Ecrouissage » et « Avec Ecrouissage ».

Zone (i) – Orientation $\phi = 25,5^\circ$

Le résultat sans écrouissage jusqu'à 1% de déformation (voir figure 4.21 et figure 4.22) montre un durcissement dû à la rotation du réseau au cours de la déformation.

Bien que le niveau de contrainte de la simulation soit en accord avec l'expérience, on observe un affaissement de la courbe plus rapide que pour l'expérimentale. Cette rotation a pour conséquence de modifier de manière significative l'activation des différents systèmes. C'est pourquoi nous avons réalisé une autre simulation sans écrouissage mais jusqu'à 7% de déformation pour identifier la variation de l'activation des systèmes au cours de la rotation. Dans ce cas, on observe qu'avec la rotation, l'activation du système 5 a fortement diminué permettant aux systèmes 13, 15, 17 et 19 de participer à la déformation de manière non négligeable, par rapport à la simulation à 1% de déformation (voir figure 4.21). Notons aussi que l'ordre des systèmes actifs du mode {111} a changé, nous en expliquerons la cause plus loin dans ce paragraphe.

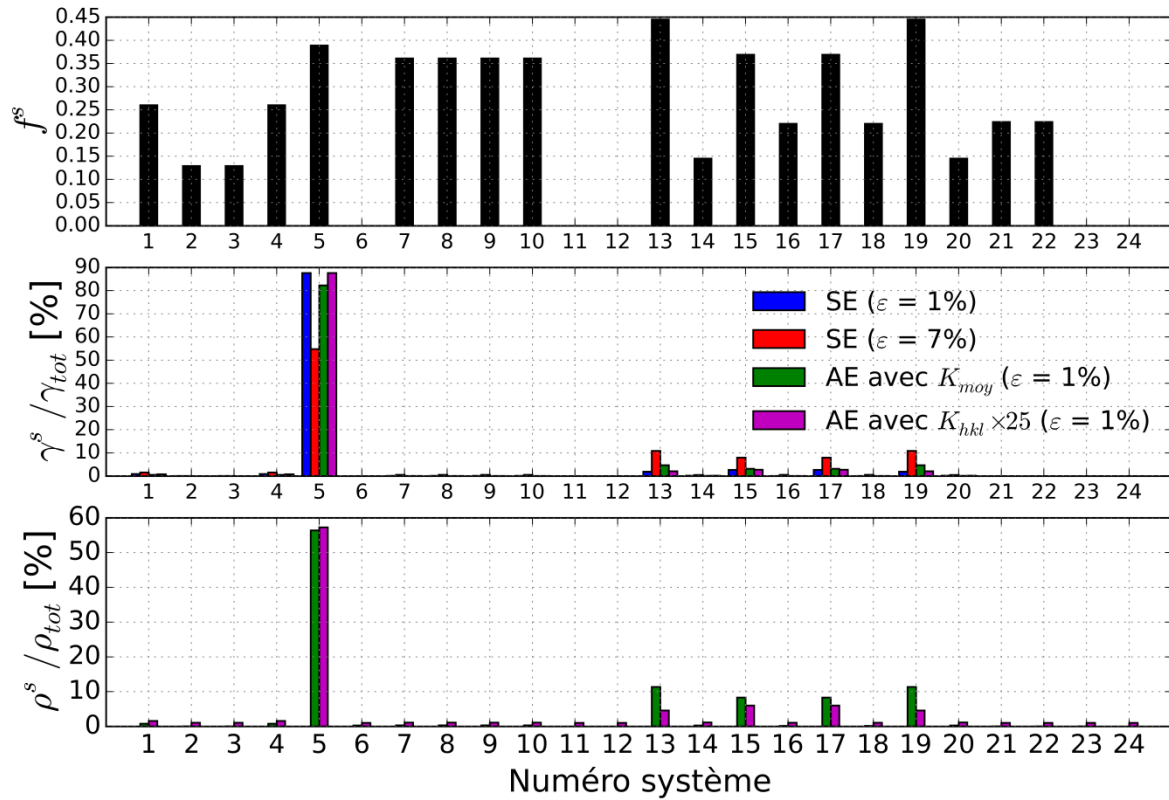


figure 4.21 : Résultats de simulation pour l'orientation $\phi = 25,5^\circ$. Le premier graphe représente la valeur du facteur de Schmid pour chaque système, le deuxième le cisaillement normalisé et le troisième la densité normalisée. SE fait référence à un calcul sans écrouissage et AE avec écrouissage.

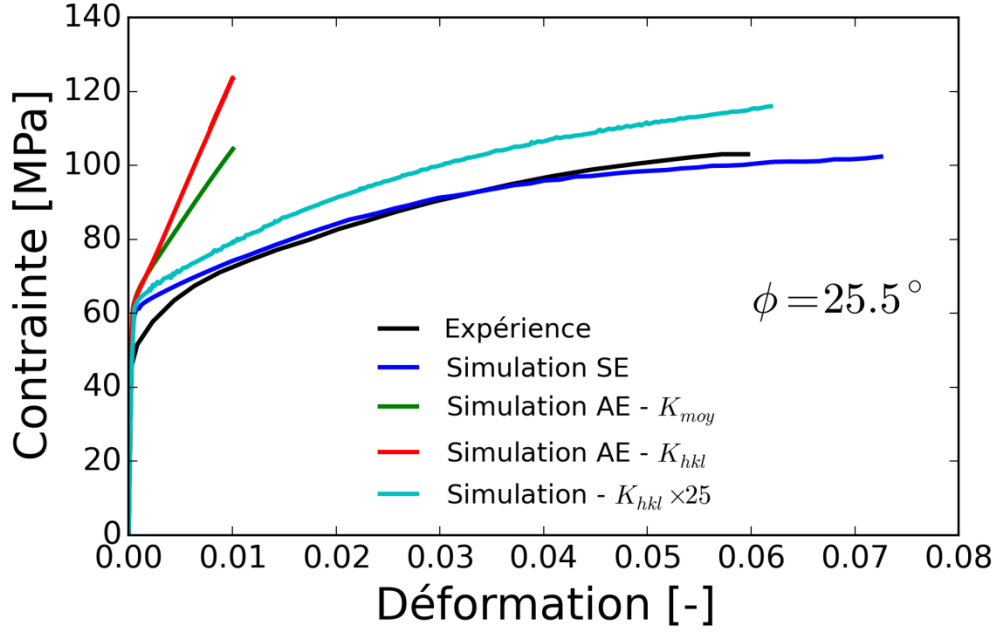


figure 4.22 : Courbes de contrainte-déformation pour l'étude de l'effet d'écrouissage pour une compression selon l'orientation $\phi = 25.5^\circ$.

En faisant intervenir de l'écrouissage à 1% de déformation avec K_{moy} , l'activation est bien conforme à l'ordre des facteurs de Schmid. Par contre, le durcissement observé est extrêmement élevé (voir figure 4.22). À ce stade, ce résultat qui n'est pas représentatif de la réalité sert simplement à déterminer les systèmes actifs. Dans ce cas, l'activation des systèmes de mode {111} est devenue non négligeable par rapport au cas sans écrouissage à 1% de déformation. Les simulations avec écrouissage (avec K_{moy}) et sans écrouissage à 7% de déformation, montrent que cinq systèmes peuvent être activés : le système 5 du mode {100} et les systèmes 13, 15, 17 et 19 du mode {111}. Cela permet donc le calcul des K_{hkl} avec l'aide de la matrice réduite aux systèmes actifs, donnée dans le tableau 4.11, et à l'aide de l'équation (4.21) :

- Le système mobile 5 rencontre les systèmes 13, 15, 17 et 19 faisant intervenir deux coefficients α_8 et deux coefficients, α_9 . Les quatre systèmes du mode {111} forment des jonctions lors de leur interaction avec le système mobile 5. Ainsi, on compte cinq systèmes actifs pour le calcul du coefficient de stockage**** :

$$\sqrt{\bar{a}} = \sqrt{\frac{2\alpha_8^2 + 2\alpha_9^2}{4}} = 0.365 \quad ; \quad n_{actifs} = 5 \quad ; \quad K_{hkl} = 2.61$$

- Les systèmes mobiles 13 et 19 rencontrent les autres systèmes actifs et forment des jonctions lors de leurs interactions. Ainsi on est également en présence de 5 systèmes actifs et on fait intervenir les coefficients α_9^* , α_{17} , α_{18} et α_{20} :

$$\sqrt{\bar{a}} = \sqrt{\frac{\alpha_9^{*2} + \alpha_{17}^2 + \alpha_{18}^2 + \alpha_{20}^2}{4}} = 0.287 \quad ; \quad n_{actifs} = 5 \quad ; \quad K_{hkl} = 2.049$$

**** L'activation n'est pas du tout symétrique et il faudrait utiliser le modèle complet proposé par Kubin et al. (2008) mais il resterait de toute façon dédié au régime athermique pour lequel on ne dispose pas de résultats expérimentaux. Par ailleurs l'effet du nombre de systèmes en $n/(n-1-\kappa)$ sur la valeur K_{hkl} n'excède par un facteur 2.

- Finalement, pour les systèmes mobiles 15 et 17, il n'y a que trois systèmes obstacles actifs qui forment des jonctions avec eux (15 et 17 sont en interaction dipolaire). Ainsi on considère qu'il n'y a que 4 systèmes actifs dans le calcul de K_{hkl} :

$$\sqrt{a} = \sqrt{\frac{\alpha_8^2 + \alpha_{17}^2 + \alpha_{18}^2}{3}} = 0,287 \quad ; \quad n_{actifs} = 4 \quad ; \quad K_{hkl} = 2,234$$

tableau 4.11 : Matrice d'interaction réduite aux systèmes actifs pour l'orientation $\phi = 25.5^\circ$. Les cases en jaune représentent les interactions d'auto-écrouissage et interactions dipolaires et doivent donc être écartées pour le calcul des K_{hkl} .

			Système obstacles						
			5	13	15	17	19		
Système mobile	5	(001)[1 $\bar{1}$ 0]	$\alpha 0$	$\alpha 9$	$\alpha 8$	$\alpha 8$	$\alpha 9$	$\alpha 0$	0,352
	13	(11 $\bar{1}$)[011]	$\alpha 9^*$	$\alpha 0$	$\alpha 17$	$\alpha 18$	$\alpha 20$	$\alpha 8$	0,4
	15	(1 $\bar{1}$ 1)[01 $\bar{1}$]	$\alpha 8^*$	$\alpha 17$	$\alpha 0$	$\alpha 19$	$\alpha 18^*$	$\alpha 8^*$	0,36
	17	(1 $\bar{1}$ 1)[101]	$\alpha 8^*$	$\alpha 18^*$	$\alpha 19$	$\alpha 0$	$\alpha 17$	$\alpha 9$	0,32
	19	(111)[10 $\bar{1}$]	$\alpha 9^*$	$\alpha 20$	$\alpha 18$	$\alpha 17$	$\alpha 0$	$\alpha 9^*$	0,320
							$\alpha 17$	0,154	
							$\alpha 18$	0,297	
							$\alpha 18^*$	0,309	
							$\alpha 19$	0,352	
							$\alpha 20$	0,38	

Les coefficients K_{hkl} obtenus sont plus de deux fois plus faibles que le $K_{moy} = 5$ que nous avons imposé dans l'étude d'écrouissage préliminaire. C'est pourquoi sur la figure 4.22, la courbe d'écrouissage avec des K_{hkl} calculés, la contrainte obtenue est encore plus forte que celle avec le K_{moy} (bien que ces coefficients K_{hkl} ne soient appliqués qu'aux coefficients d'interactions entre systèmes actifs donnés par le tableau 4.11). Ce résultat montre clairement que l'utilisation d'une loi de type forêt alors que le régime est clairement thermiquement activé pose problème.

Comme nous l'avons évoqué en section 4.1, n'étant pas en mesure de calculer les coefficients d'interaction dans un régime thermiquement activé, en raison du manque de données sur l'orientation dure (vis ou coin) et sur les lois de vitesses associées à chaque caractère, on applique une correction simple pour tenter de calibrer l'écrouissage dans ce domaine de glissement. Nous avons décidé de n'intervenir que sur un paramètre, celui des libres parcours moyens et de multiplier toutes les valeurs de K_{hkl} par 25 afin de reproduire l'évolution de la contrainte au cours de la déformation (voir figure 4.22).

Cela traduit l'impact des forts effets de friction de réseau avec certaines jonctions qui ne se forment pas ou qui ne sont pas aussi longues qu'en régime athermique et par conséquent le stockage est moins fort. Bien sûr la réalité est plus complexe, a minima une correction de K_{hkl} devrait être accompagnée d'une correction des coefficients d'interaction qui doivent baisser eux aussi.

Afin d'illustrer l'effet d'une contrainte de Peierls élevée (friction de réseau), prenons à titre d'exemple la cartographie d'une jonction assez forte figure 4.11(a). Imaginons que le caractère coin soit l'orientation dure pour les 2 systèmes en présence, l'intersection des caractères coins se situe en périphérie du lobe de cette cartographie. *A priori* cela a pour conséquence d'induire une forte probabilité de formations de jonction mais des jonctions en moyenne assez courtes par rapport à celles que l'on peut avoir au centre du lobe quand les dislocations parentes sont bien orientées dès le départ. Mais la situation est en fait bien plus défavorable, car pour former la jonction les lignes doivent quitter l'orientation coin pour s'orienter selon l'intersection des plans de glissement et la contrainte de Peierls s'y oppose fortement. La jonction obtenue risque d'être encore plus courte que prévue. Maintenant si on suppose cette fois que ce sont en majorité des vis qui bougent doucement, l'interaction de ces dislocations vis (à 90° des coins) se situerait cette fois complètement à l'extérieur du lobe donnant alors une valeur de coefficient d'interaction proche des coefficients de type Hirth qui ne forment pas de jonction et surtout n'induisant pas de stockage donc associé à un coefficient $K = K_I = 150$.

Une analyse analogue donne un résultat un peu plus favorable à la formation de jonctions glissiles entre dislocations coins ou entre dislocations vis et coin (figure 4.11 (b)) et conduit à la quasi absence de jonctions pour la Hirth (figure 4.11(c)) quels que soient les cas. Il convient par contre de noter que l'interaction colinéaire (figure 4.13) avec sa très vaste zone de réaction n'est pas impactée au moins sur la base de cette analyse qualitative.

N'ayant aujourd'hui aucune certitude sur les caractères de dislocations prédominants et les contraintes associées aux différents caractères de dislocations pour chaque mode de glissement, l'analyse faite ici ne peut pas être étendue pour modifier les valeurs de coefficients. Par contre, cela permet d'illustrer la diminution de probabilité de formation de jonctions et donc la diminution du stockage quel que soit le cas de figure considérés et de justifier l'augmentation empirique des K_{hkl} .

Dans la figure 4.21, nous pouvons remarquer que l'ordre d'activation des systèmes de mode {111} change significativement selon les paramètres utilisés pour l'écroutissage. En effet, à 1% de déformation et sans écroutissage, le système 5 est celui avec le facteur de Schmid le plus grand et c'est celui qui est le plus actif en accommodant presque 90% de la déformation. Pour les autres systèmes actifs du mode {111} nous pouvons observer que l'activation des systèmes 13 et 19 est moins forte que celle des systèmes 15 et 17 alors que leurs facteurs de Schmid sont plus élevés. En effet, les systèmes 13 et 19 ont des directions de cisaillement proches de celle du système 5 alors qu'aucun système de mode {100} n'est très actif dans les directions de cisaillement des systèmes 15 et 17. Ainsi, les systèmes 13 et 19 ne sont pas sollicités tant qu'il y a une forte activation du système 5 alors que les systèmes 15 et 17 sont seuls pour accommoder la déformation dans leurs directions respectives. Il y a une sorte de blocage effectif de 13 et 19 par 5.

Avec un écrouissage utilisant un K_{moy} à 1% de déformation, l'ordre des systèmes par rapport aux facteurs de Schmid est rétabli. Cela est dû à la forte densité de dislocations générées sur le système 5 qui se bloque lui-même et est moins activé. Sur la figure 4.21, nous pouvons observer que, dans ce cas, l'activation des systèmes 13 et 19 a faiblement baissé par rapport celle des systèmes 15 et 17. On retrouve ainsi l'ordre d'activation cohérent par rapport au facteur de Schmid. En effet, bien qu'il y ait de l'écrouissage, l'activation du système 5 ayant fortement baissé, les systèmes 13 et 19 peuvent glisser plus librement.

Finalement, avec un écrouissage utilisant un $K_{hkl} \times 25$, l'activation des systèmes de mode {111} a fortement diminué alors que celle du système 5 a augmenté par rapport au cas précédent. De ce fait, l'ordre d'activation des systèmes est à nouveau limité par la forte activation du mode {100}.

Zone (ii) – Orientation $\phi = 2^\circ$

Ici, nous étudions l'effet de l'écrouissage pour l'orientation $\phi = 2^\circ$ afin d'identifier la possibilité de la désactivation des systèmes $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{111\}$ pour laisser place aux systèmes $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{110\}$. De plus, il a été observé expérimentalement que seulement deux systèmes sur quatre sont actifs. Nous vérifions si ceci est possible grâce à la prise en compte de l'écrouissage.

Sur la figure 4.23, le résultat de simulation sans écrouissage (en bleu) montre une sous-estimation de la contrainte comparée au résultat expérimental (en noir). En intégrant l'écrouissage avec un K_{moy} , la contrainte est une fois de plus très surestimée. Avec le calcul des $K_{hkl} \times 25$ donc recalibrés (en rouge), comme réalisé précédemment, la valeur de contrainte devient plus proche de l'expérimentale mais sans réel accord quant à l'évolution précise de cette dernière. Les simulations précédentes ont montré que 12 systèmes sont actifs : les systèmes de 7 à 10 du mode {110} et les systèmes de 13 à 20 du mode {111}.

Les calculs des K_{hkl} (voir tableau 4.12 pour la matrice simplifiée) donnent :

- Pour les systèmes mobiles 7, 8, 9 et 10 :

$$\sqrt{\bar{a}} = \sqrt{\frac{2\alpha_{11}^2 + 2\alpha_{12}^2 + 2\alpha_{14}^2 + 2\alpha_{15}^2}{8}} = 0,429 \quad ; \quad n_{actifs} = 9 \quad ; \quad K_{hkl} = 2,680$$

- Pour les systèmes de 13 à 20 :

$$\sqrt{\bar{a}} = \sqrt{\frac{\alpha_{12}^2 + \alpha_{14}^{2*} + \alpha_{15}^{2*} + 2\alpha_{17}^2 + \alpha_{18}^2 + \alpha_{18}^{2*} + \alpha_{20}^2}{9}} = 0,428 \quad ; \quad n_{actifs} = 10 \quad ; \quad K_{hkl} = 2,630$$

De manière générale, les cisaillements, donnés dans la figure 4.24, montrent que les systèmes du mode {111} (13, 15, 17 et 19) sont les plus actifs alors qu'expérimentalement, les systèmes de mode {110} (7 à 10) sont observés. Si la simulation ne reproduit pas l'expérience, c'est dû à l'activation plus forte de {111} par

rapport à $\{110\}$. En effet, les systèmes de ces deux modes ont les mêmes paramètres mais avec un τ_0 plus faible pour le mode $\{111\}$ que pour le mode $\{110\}$ (voir le tableau 4.9).

En intégrant l'écrouissage par les interactions avec une K_{moy} , on voit que les systèmes 14, 16, 18 et 20 (mode $\{111\}$), se désactivent tandis les systèmes du mode $\{110\}$ sont activés de manière non négligeable. Ceci est dû aux interactions colinéaires entre les systèmes 14-7, 16-8, 18-9 et 20-10. C'est en effet ce à quoi on s'attendait avec une désactivation des systèmes de mode $\{111\}$ et une réactivation des systèmes de mode $\{110\}$. Cependant, pour être cohérent avec les observations de cisaillement expérimentales, il faut que le cisaillement sur les systèmes $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{110\}$ soit plus élevé que celui sur les systèmes $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{111\}$, or ce n'est pas le cas. La désactivation obtenue est donc insuffisante.

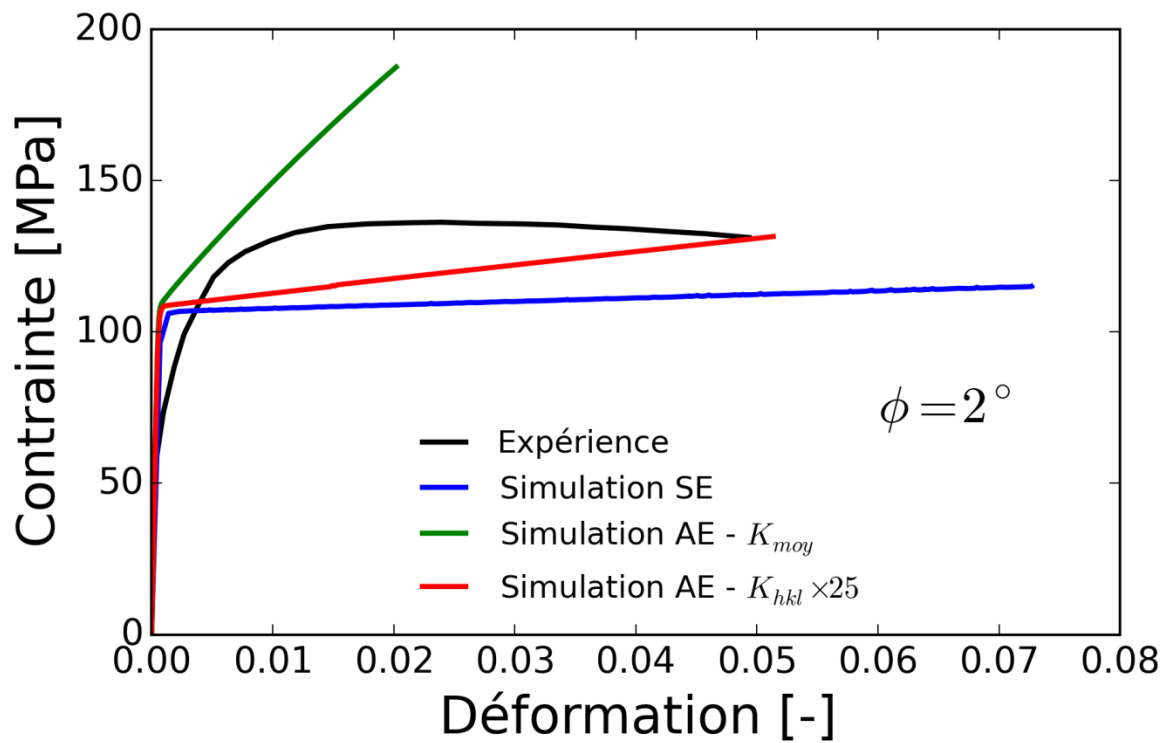


figure 4.23 : Courbes de contrainte-déformation pour l'étude de l'effet d'écrouissage pour une compression selon l'orientation $\phi = 2^\circ$

tableau 4.12 : Matrice d'interaction réduite aux systèmes actifs pour l'orientation $\phi = 2^\circ$. Les cases en jaune représentent les interactions d'auto-écrouissage et interactions dipolaires et les cases vertes représentent les coefficients qui ne forment pas de jonctions et doivent donc être écartées pour le calcul des K_{hkl} . Les cases en rouge représentent les coefficients colinéaires.

			Système forêt													
			7	8	9	10	13	14	15	16	17	18	19	20	α_0	0,352
Systèmes mobile	7	(01 $\bar{1}$)[011]	α_0	α_{10}	α_{11}	α_{11}	α_{12}	α_{12}	α_{13}	α_{13}	α_{14}	α_{15}	α_{14}	α_{15}	α_{10}	0,152
	8	(011)[01 $\bar{1}$]	α_{10}	α_0	α_{11}	α_{11}	α_{13}	α_{13}	α_{12}	α_{12}	α_{15}	α_{14}	α_{15}	α_{14}	α_{11}	0,255
	9	(10 $\bar{1}$)[101]	α_{11}	α_{11}	α_0	α_{10}	α_{15}	α_{14}	α_{15}	α_{14}	α_{12}	α_{12}	α_{13}	α_{13}	α_{12}	0,690
	10	(101)[10 $\bar{1}$]	α_{11}	α_{11}	α_{10}	α_0	α_{14}	α_{15}	α_{14}	α_{15}	α_{13}	α_{13}	α_{12}	α_{12}	α_{13}^*	0,147
	13	(1 $\bar{1}$ $\bar{1}$)[011]	α_{12}	α_{13}^*	α_{15}^*	α_{14}^*	α_0	α_{16}	α_{17}	α_{17}	α_{18}	α_{19}	α_{20}	α_{18}^*	α_{14}	0,320
	14	(1 $\bar{1}$ $\bar{1}$)[011]	α_{12}	α_{13}^*	α_{14}^*	α_{15}^*	α_{16}	α_0	α_{17}	α_{17}	α_{20}	α_{18}^*	α_{18}	α_{19}	α_{14}^*	0,317
	15	(1 $\bar{1}$ $\bar{1}$)[01 $\bar{1}$]	α_{13}^*	α_{12}	α_{15}^*	α_{14}^*	α_{17}	α_{17}	α_0	α_{16}	α_{19}	α_{18}	α_{18}^*	α_{20}	α_{15}	0,303
	16	(111)[01 $\bar{1}$]	α_{13}^*	α_{12}	α_{14}^*	α_{15}^*	α_{17}	α_{17}	α_{16}	α_0	α_{18}^*	α_{20}	α_{19}	α_{18}	α_{15}^*	0,278
	17	(1 $\bar{1}$ $\bar{1}$)[101]	α_{14}^*	α_{15}^*	α_{12}	α_{13}^*	α_{18}	α_{20}	α_{19}	α_{18}^*	α_0	α_{16}	α_{17}	α_{17}	α_{16}	0,783
	18	(1 $\bar{1}$ $\bar{1}$)[101]	α_{15}^*	α_{14}^*	α_{12}	α_{13}^*	α_{19}	α_{18}^*	α_{18}	α_{20}	α_{16}	α_0	α_{17}	α_{17}	α_{17}	0,154
19	(111)[10 $\bar{1}$]	α_{14}^*	α_{15}^*	α_{13}^*	α_{12}	α_{20}	α_{18}	α_{18}^*	α_{19}	α_{17}	α_{17}	α_0	α_{16}	α_{18}	0,297	
20	(1 $\bar{1}$ $\bar{1}$)[10 $\bar{1}$]	α_{15}^*	α_{14}^*	α_{13}^*	α_{12}	α_{18}^*	α_{19}	α_{20}	α_{18}	α_{17}	α_{17}	α_{16}	α_0	α_{18}^*	0,309	
															α_{19}	0,352
															α_{20}	0,381

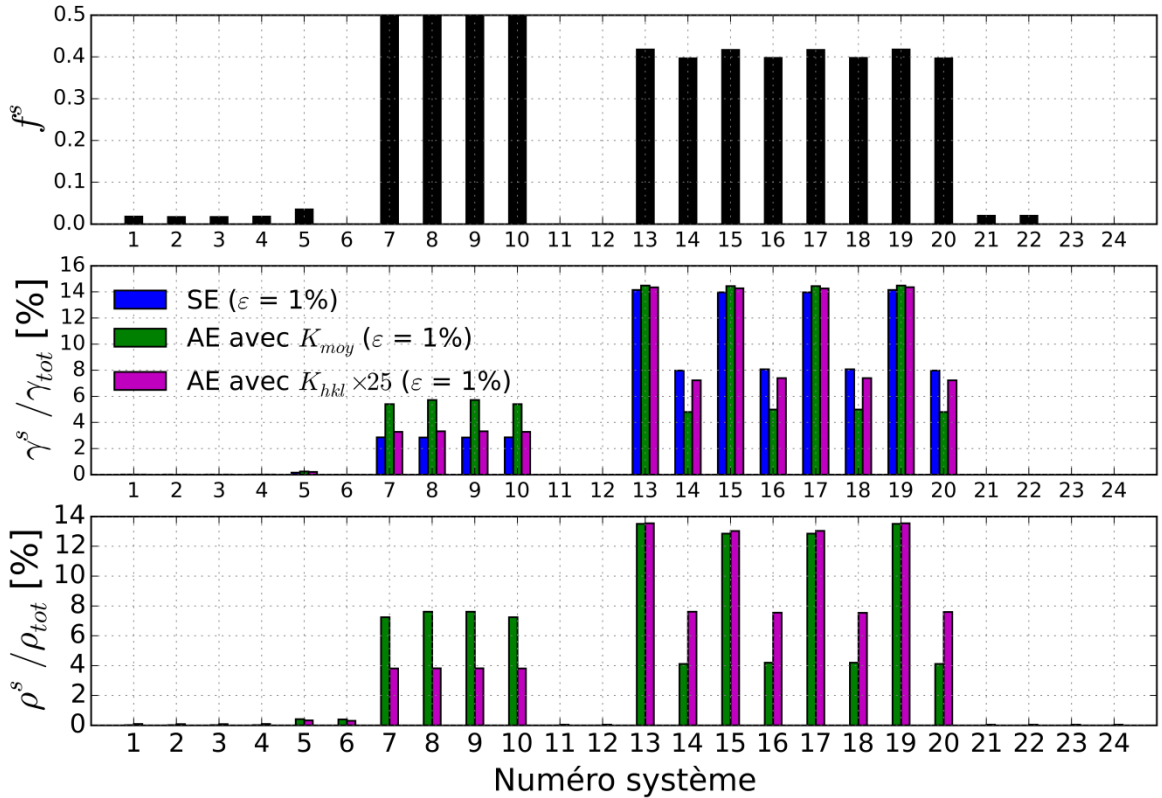


figure 4.24 : Résultats de simulation pour l'orientation $\phi = 2^\circ$. Le premier graphe représente la valeur du facteur de Schmid pour chaque système, le deuxième le cisaillement normalisé et le troisième la densité normalisée. SE fait référence à un calcul sans écrouissage et AE avec écrouissage.

Concernant l'asymétrie des activations des systèmes $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle\{110\}$ observée expérimentalement, nous pouvons voir que les activations des systèmes de 7 à 10 sont égales lorsqu'il n'y a pas d'écrouissage. Par contre, en intégrant de l'écrouissage, les systèmes 7 et 10 sont moins activés que les systèmes 8 et 9. Pourtant ces quatre systèmes voient les mêmes coefficients d'interactions. En regardant plus attentivement, on peut résumer les interactions de la manière suivante :

- Système 7 :
 - α_{14} avec 17 et 19 (ρ^{17} et ρ^{19} faible)
 - α_{15} avec 18 et 20 (ρ^{18} et ρ^{20} fort)
- Système 8 :
 - α_{15} avec 17 et 19 (ρ^{17} et ρ^{19} faible)
 - α_{14} avec 18 et 20 (ρ^{18} et ρ^{20} fort)

α_{14} étant plus élevé que α_{15} , le système 7, qui rencontre les systèmes à forte densité associés à ce coefficient, est davantage écrouis que le système 8 et donc moins activé. Encore une fois, nous obtenons la même tendance que celle obtenue expérimentalement cependant, elle n'est pas suffisante pour atteindre l'activation de 2 systèmes sur 4.

Ces résultats obtenus en utilisant un K_{moy} restent valables avec $K_{hkl} \times 25$, c'est-à-dire recalé empiriquement, mais la bonne tendance est naturellement moins sensible avec un écrouissage plus faible.

Pour résumer nous avons vu qu'il n'est pas possible d'avoir le bon ordre d'activation des différents systèmes avec des densités de dislocations réalistes et une contrainte comparable à l'expérience. Cependant, il est nécessaire de souligner que les tendances sont respectées avec une désactivation des systèmes $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle\{111\}$ au profit des systèmes $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle\{110\}$ et qu'une asymétrie des systèmes $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle\{110\}$ est possible grâce aux interactions. On ne peut pas exclure que la forme inadaptée de l'écrouissage soit en partie à l'origine de cette trop faible désactivation mais il semble quand même probable que lorsque l'activation thermique domine, des désactivations via les interactions comme observé par [Dequiedt et al. \(2015\)](#) dans le cas du cuivre, soient moins probables et moins marquées.

Zone (iii) - Orientation $\Omega = 20^\circ$

Pour cette orientation, le résultat attendu est la désactivation des systèmes de mode $\{100\}$ au profit de ceux du mode $\{111\}$. Notons que nous n'avons pas de courbe expérimentale mais seulement une contrainte de l'ordre de 110 MPa à 2% de déformation (voir section 3.3.1 page 58).

La courbe de contrainte sans écrouissage obtenue, sur la figure 4.25, montre qu'à 2% de déformation, la contrainte simulée n'atteint pas 110 MPa. Quatre systèmes du mode $\{100\}$ (de 3 à 6) sont actifs et accommodent la quasi-totalité de la déformation à eux seuls.

Lors de l'écrouissage en utilisant un K_{moy} le durcissement obtenu est fort et l'activation des systèmes de mode $\{111\}$ est toujours quasiment négligeable.

Pour le calcul des K_{hkl} , nous utilisons le tableau 4.13 et obtenons le résultat de $\sqrt{\bar{a}} = \sqrt{\frac{2\alpha_2^2}{2}} = 0,354$; $n_{actifs} = 3$; $K_{hkl} = 3,228$.

La simulation en utilisant ce coefficient multiplié par 25 montre une contrainte encore très sous-estimée.

tableau 4.13 : Matrice d'interaction réduite aux systèmes actifs pour l'orientation $\Omega = 20^\circ$. Les cases en jaune représentent les interactions d'auto-écrouissage et interactions dipolaires qui ne forment pas de jonctions et doivent donc être écartées pour le calcul des K_{hkl} .

		Système forêt					
		3	4	5	6	$\alpha 0$	$\alpha 1$
Système mobile	3	(010)[101]	$\alpha 0$	$\alpha 1$	$\alpha 2$	$\alpha 2$	$\alpha 2$
	4	(010)[101]	$\alpha 1$	$\alpha 0$	$\alpha 2$	$\alpha 2$	$\alpha 2$
	5	(001)[110]	$\alpha 2$	$\alpha 2$	$\alpha 0$	$\alpha 1$	$\alpha 1$
	6	(001)[110]	$\alpha 2$	$\alpha 2$	$\alpha 1$	$\alpha 0$	$\alpha 0$

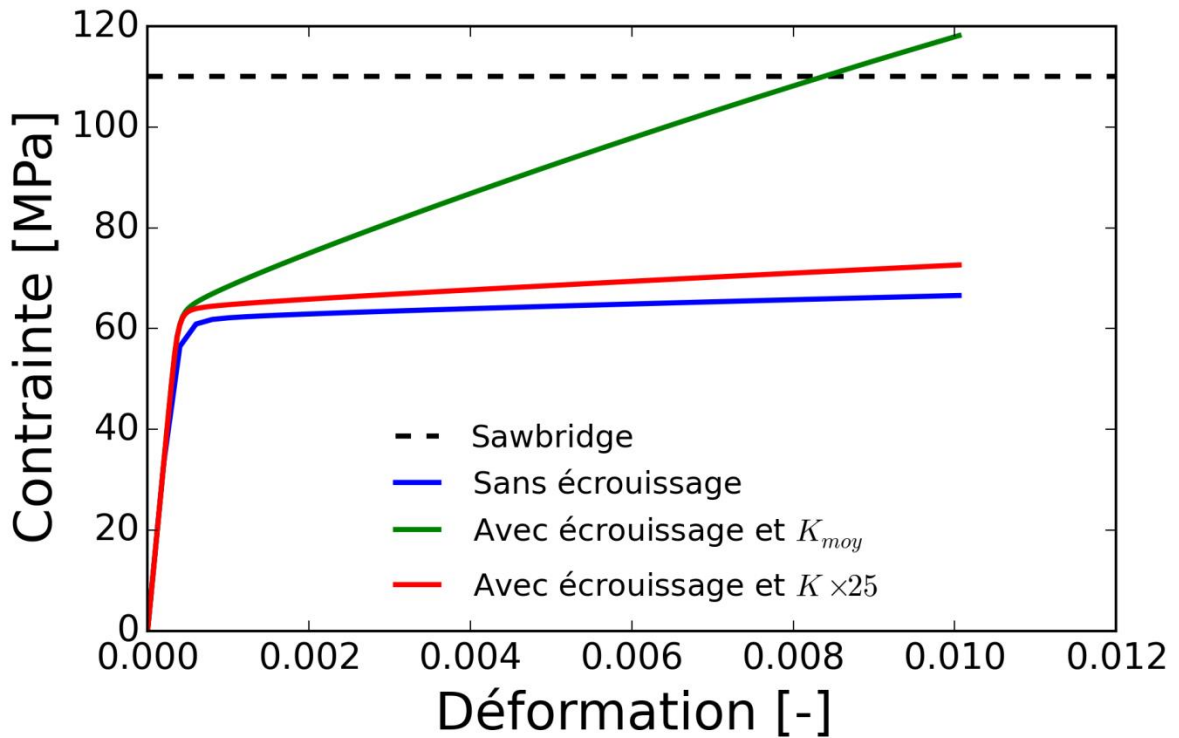


figure 4.25 : Courbes de contrainte-déformation pour l'étude d'écrouissage pour l'orientation $\Omega = 20^\circ$

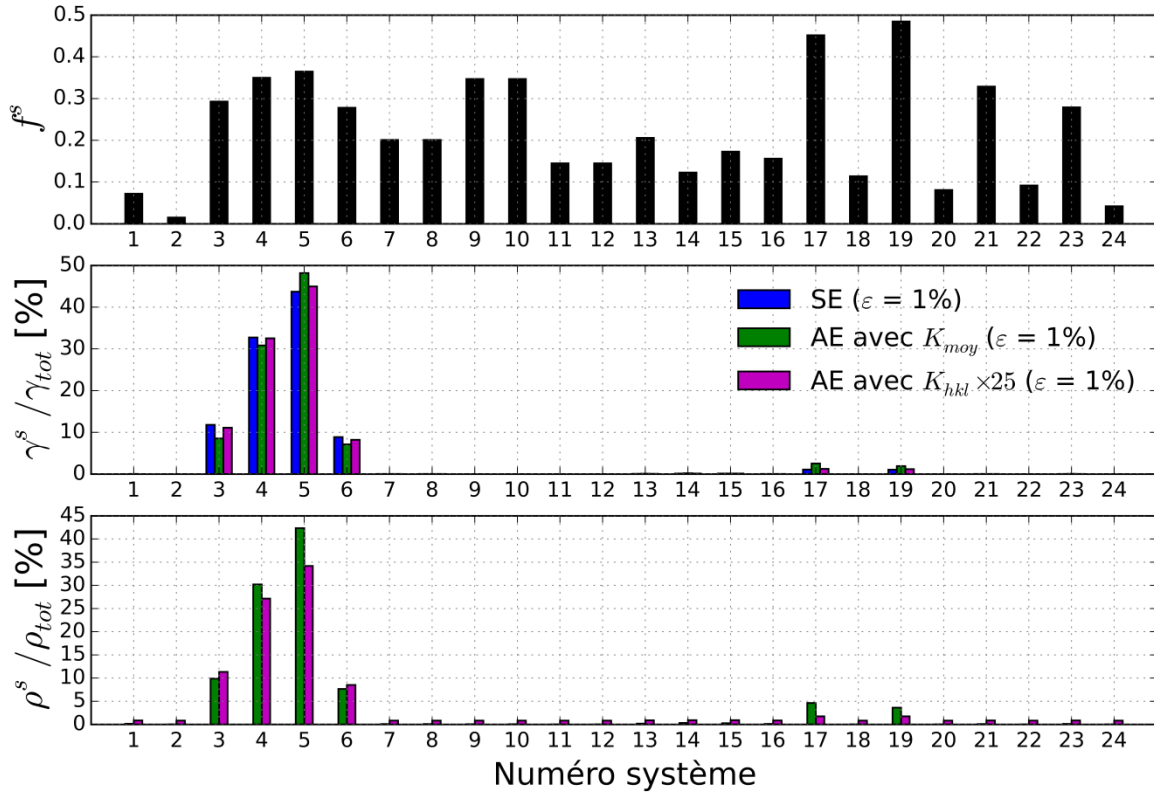


figure 4.26 : Résultats de simulation pour l'orientation $\Omega = 20^\circ$. Le premier graphe représente la valeur du facteur de Schmid pour chaque système, le deuxième le cisaillement normalisé et le troisième la densité normalisée. SE fait référence à un calcul dans écouissage et AE avec écouissage.

Concernant l'activation des systèmes avec écouissage, nous pouvons voir que l'activation des systèmes de mode $\{100\}$ a très faiblement diminuée tandis que le cisaillement des systèmes de mode $\{111\}$ les plus actifs, a très faiblement augmenté. Encore une fois, la tendance est présente mais encore moins significative que dans le cas $\phi = 2^\circ$.

4.5.3. Conclusions et discussions

Cette étude montre que l'utilisation d'un modèle de stockage restauration dérivé de celui de Kocks et en particulier de celui de la forêt dans un régime thermiquement activé n'est comme attendu pas adaptée car cela induit un durcissement extrêmement fort. Faute de pouvoir proposer un modèle dédié à l'activation thermique en raison d'un manque de données sur la mobilité dislocations en particulier pour le mode $\{111\}$ nous avons modifié empiriquement le coefficient K_{hkl} qui influe sur le stockage en le calibrant sur la première orientation étudiée pour corriger l'intensité de l'écrouissage. Cette correction traduit que beaucoup de jonctions ne se forment pas ou moins bien à cause de l'effet de la contrainte de Peierls, nous avons obtenu alors naturellement un écouissage plus faible et plus en accord avec l'expérience qui nous a permis d'estimer l'effet des interactions sur l'activation des systèmes.

Pour cela, nous avons utilisé le modèle en considérant une activation intermédiaire des systèmes de glissement $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle\{111\}$ par rapport aux systèmes $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle\{100\}$ et $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle\{110\}$ conformément aux études atomistiques de la littérature. Avec les différentes interactions entre systèmes, on constate que certains sont partiellement désactivés alors que d'autres sont, au contraire, plus actifs par rapport à un cas sans écrouissage. Il est intéressant de noter que ces activations et désactivations, permettent d'obtenir des résultats plus en accord avec les observations de glissement expérimentales. Cependant, avec un écrouissage faible pour être compatible avec les valeurs expérimentales, les changements d'activation sont négligeables. En l'état cet effet n'est pas prépondérant dans la restitution de l'anisotropie viscoplastique et la désactivation des systèmes est naturellement moins marquée quand l'activation thermique domine les effets d'interactions. Ce résultat ne devrait pas être remis en cause quand un modèle compatible avec l'activation thermique sera disponible. Cela suggère que la bonne tendance observée n'est pas la piste principale à suivre pour améliorer le modèle.

On remarque quand même que les systèmes apportant les trop modestes améliorations dans la restitution de l'activation des systèmes sont surtout ceux en interactions colinéaires, c'est-à-dire les systèmes associés à un même vecteur de Burgers donc susceptibles d'être couplés via un mécanisme résultant du glissement dévié. L'effet du glissement dévié est largement évoqué dans la littérature expérimentale d' UO_2 [[Yust et McHargue \(1969\)](#), [Sawbridge et Sykes \(1971\)](#), [Lefebvre \(1976\)](#), [Alamo et al. \(1978\)](#), [Keller et al. \(1988a\)](#), [Keller et al. \(1988b\)](#)] mais sans que son rôle soit clairement établi. En particulier pour Sawbridge, le glissement dévié vers les plans $\{111\}$ induirait de façon contre intuitive une augmentation effective de la CRSS des systèmes $\{100\}$ qui basculeraient dans un glissement composite impliquant les plans $\{111\}$ dont la CRSS contrôlerait in fine le glissement combiné des deux modes puisque la CRSS des plans $\{111\}$ est plus élevée. Il apparaît donc que la prise en compte du glissement dévié dans le modèle doit être améliorée et que son rôle ne se borne pas à contrôler la densité de dislocations à saturation comme actuellement dans notre approche.

4.6. Conclusions

Dans ce chapitre, nous avons déterminé les coefficients de la matrice d'interaction spécifique pour l' UO_2 afin de prendre en compte les effets d'interaction entre dislocations dans le modèle de plasticité cristalline. Ces coefficients ont été déterminés en régime quasi-statique en utilisant l'approximation de Bacon-Scattergood à mi-chemin entre élasticité isotrope et anisotrope qui est un bon compromis entre précision et coûts de calcul. On retrouve comme dans les CFC des jonctions de Hirth associées à des coefficients très faibles (la particularité de l' UO_2 étant que ces jonctions ne se forment parfois tout simplement pas), des jonctions de Lomer et glissiles fortes et des interactions colinéaires très fortes. Notons aussi que l'analyse qualitative sur la base des

cartographies d'interaction suggère que l'activation thermique devrait conduire à affaiblir toutes les jonctions (et prioritairement les plus faibles en particulier les Hirth) tandis que l'interaction colinéaire en raison de ses très vastes zones de réaction devrait être beaucoup moins affectée.

L'intégration des coefficients dans le modèle de plasticité cristalline et les calculs par EF ont confirmé que l'utilisation d'une loi de type forêt n'était pas adaptée lorsque l'activation thermique est significative. En effet, les résultats des simulations montrent pour différentes orientations cristallines que l'évolution de la contrainte au cours de la déformation est largement surestimée. De plus, bien que les tendances d'activation des différents systèmes de glissement soient correctes pour pouvoir interpréter l'anisotropie viscoplastique et prédire les modes de glissement observés expérimentalement, elles ne sont pas suffisamment significatives. En modifiant le modèle pour ajuster l'évolution de la contrainte ces tendances sont devenues encore moins significatives. Autrement dit, les interactions ne semblent pas jouer un rôle prépondérant sur l'activation des systèmes dans l'UO₂ lorsqu'il y a encore de l'activation thermique. Les écarts d'anisotropie observés dans le chapitre 3 ne proviennent donc pas des interactions entre dislocations. Par contre, le lien entre les tendances d'activation des systèmes observés dans ce chapitre font intervenir les systèmes de même Burgers mettant l'hypothèse du glissement dévié au premier plan.

5. Polycristaux d'UO₂

Dans ce chapitre, nous nous intéressons à la simulation du comportement des polycristaux de dioxyde d'uranium. Précédemment (chapitre 3), nous avons construit un modèle de viscoplasticité cristalline pour lequel les paramètres ont été identifiés à partir d'essais de compression sur monocristaux. Bien que certains phénomènes restent encore à approfondir, principalement liés à l'activation des systèmes de glissement $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{111\}$, le modèle restitue suffisamment bien l'anisotropie vicoplastique de l'UO₂ pour pouvoir être utilisé dans un calcul de polycristal. De plus, la matrice d'interaction des dislocations présentée au chapitre 4, permet de prendre en compte l'effet de la taille de grain aussi connu sous l'effet Hall-Petch à l'aide des dislocations géométriquement nécessaires (GNDs pour Geometrically Necessary Dislocations). L'objectif de cette partie est de présenter les travaux réalisés pour simuler le comportement d'un polycristal et pour valider les résultats de calcul avec les essais de compression sur pastille combustible.

Sommaire

5.1. Motivation	138
5.2. Méthode de simulation EF des polycristaux et comparaison avec l'expérience	138
5.2.1. Génération du maillage polycristallin	139
5.2.2. Choix du nombre de grain du polycristal	142
5.2.3. Durcissement par interactions de dislocations dans un polycristal	144
5.2.4. Calcul des GNDs par éléments finis	146
5.2.5. Modification du durcissement induit par une répartition continue des ρ_{GND}	151
5.2.6. Méthode de comparaison calcul-mesure de la courbure du réseau cristallin	156
5.2.7. Essais de référence et méthode de comparaison simulation-expérience	157
5.3. Résultats	163
5.3.1. Choix du nombre de grain du polycristal	163
5.3.2. Sensibilité de la contrainte au raffinement de maillage	165
5.3.3. Sensibilité de la vitesse de déformation à la contrainte et à la température	166
5.3.4. Validation du calcul des GNDs	171
5.4. Discussions	177
5.4.1. Sensibilité de la vitesse de déformation à la contrainte et à la température	177
5.4.2. Prédiction de la contrainte en fonction de la taille de grain	178
5.4.3. Implication d'autres mécanismes	178
5.5. Conclusions	180

5.1. Motivation

Historiquement, les premières études de caractérisation de la viscoplasticité de l'UO₂ considérant les mécanismes de glissement de dislocations ont été réalisées avec des techniques d'homogénéisation à champs moyens [Sauter (2001), Sauter et Leclercq (2003)]. Par la suite, l'approche en champs complets par éléments finis a été appliquée à ce matériau [Pacull (2011), Soulacroix (2014)] afin de prendre en compte dans la simulation les hétérogénéités des contraintes et des déformations dans les grains. Les premiers résultats de cette approche à champs complets ont pu mettre en évidence l'impact de ces hétérogénéités sur le comportement viscoplastique de l'UO₂. Nos travaux poursuivent le développement de cette approche à champ complet afin d'enrichir la formulation du modèle de viscoplasticité basé sur le glissement des dislocations, et de proposer une validation plus étendue des résultats intégrant les effets microstructuraux avec des grandeurs observables relevant de l'échelle microscopique.

Ce chapitre s'organise en trois volets, avec comme première partie la description des méthodes utilisées d'une part pour la simulation par EF du comportement du polycristal, et d'autre part pour la comparaison des résultats de simulation avec l'expérience. Dans la deuxième partie, nous présentons l'ensemble des simulations réalisées et les comparaisons avec l'expérience. Enfin, l'interprétation de ces résultats sera discutée avec les conclusions dans une dernière partie.

5.2. Méthode de simulation EF des polycristaux et comparaison avec l'expérience

L'intérêt d'une approche à champs complet, avec la simulation par EF, est de pouvoir décrire les hétérogénéités de contrainte et de déformation dans chaque grain. Pour illustrer ce propos, considérons deux éléments séparés par un joint de grain (JdG). Numériquement, cela se traduit simplement par le fait que les deux éléments ont des orientations cristallines différentes discontinues au JdG. Notons que dans l'approche utilisée le comportement surfacique du JdG n'est pas modélisée, et que la continuité du déplacement est imposée à l'interface entre les grains par les fonctions de forme du maillage EF. Ainsi, la réaction mécanique de l'interface va induire une incompatibilité de déformation entre les grains voisins du fait de l'anisotropie du comportement et de la différence d'orientation des grains. Cette incompatibilité va modifier l'équilibre mécanique local avec des zones difficiles à déformer autour des JdG et des zones plus faciles à déformer au centre des grains. Cela permet donc d'avoir une description plus précise du comportement local par comparaison avec des techniques d'homogénéisation à champs moyens.

Dans les parties suivantes, nous décrivons les principales méthodes nécessaires pour réaliser les calculs EF et comparer le comportement simulé du polycristal avec les

données issues d'essai de compression sur pastille à haute température. Certaines de ces méthodes ont été développées spécifiquement dans le cadre de cette thèse.

5.2.1. Génération du maillage polycristallin

La génération de maillage d'un polycristal se fait en trois étapes. Il faut dans un premier temps générer les centres des grains plus couramment appelés germes, puis construire la géométrie des grains (surfaces, arrêtes et sommets) à partir de ces germes et enfin appliquer un maillage EF à cette géométrie. La construction géométrique des grains à partir des germes peut se faire par plusieurs méthodes, ou diagrammes, et les plus connus sont : le diagramme de Voronoï, le diagramme de Laguerre et le diagramme de Johnson-Mehl. Notons que lors de l'étape de génération du maillage EF, il est impératif que les arrêtes issues du diagramme utilisé ne soient pas trop courtes pour éviter un raffinement excessif imposé par la différence de longueur entre les différentes arrêtes. Cette taille minimale des arêtes peut être contrôlée par la répartition spatiale des germes ou par une modification du diagramme consistant à simplifier la géométrie en supprimant les arrêtes trop courtes.

Le construction du diagramme de Voronoï [Aurenhammer (1987)] repose sur des germes ponctuels définis de manière aléatoire ou contrôlée. Les limites du domaine V_i issu de chaque germe x_i sont définies à partir de l'équation (5.1). Ainsi, un domaine V_i est de forme polyédrique avec des JdG plans qui sont équidistants des germes des deux grains voisins.

$$x \in V_i \Leftrightarrow \min(\|x_j - x\|) = \|x_i - x\| \quad (5.1)$$

Les diagrammes de Laguerre et Johnson-Mehl [Aurenhammer (1987), Lautensack et Zuyev (2008)] sont basés sur un principe similaire mais intègre la notion de germes volumiques avec un rayon r_i associé. La différence entre ces deux méthodes est que le diagramme de Laguerre est d'ordre 2 (voir équation (5.2)) tandis que celui de Johnson-Mehl est d'ordre 1 (voir équation (5.3)) engendrant dans le premier cas des joints de grains plans et dans le deuxième des joints de grains courbes. Ces deux méthodes sont plus coûteuses que le diagramme de Voronoï.

$$x \in V_i \Leftrightarrow \min(\|x_j - x\|^2 - r_i^2) = \|x_i - x\|^2 - r_i^2 \quad (5.2)$$

$$x \in V_i \Leftrightarrow \min(\|x_j - x\| - r_i) = \|x_i - x\| - r_i \quad (5.3)$$

Pacull (2011) a mis en place, dans sa thèse, les outils permettant la génération des polycristaux basée sur le diagramme de Voronoï. La figure 5.1 illustre un polycristal de 300 grains générés avec ces outils. Ainsi, il a réalisé une étude pour s'assurer que la géométrie générée est proche de celle de l'expérience en se basant sur des coupes 2D et

des critères donnant le nombre de faces et la fonction de répartition de la taille des grains. Par la suite, [Soulacroix \(2014\)](#) a étendu cette validation en comparant ces trois diagrammes avec des données 2D et 3D. Les critères utilisés sont basés sur les répartitions de la taille de grain, le nombre de voisin et la forme des grains, ainsi que les lois d'Aboav-Weaire et de Lewis. La première loi donne la relation récursive entre le nombre de grains voisins des grains voisins d'un grain primaire considéré et son nombre de grain voisin. La deuxième loi donne la relation entre la taille de grain et son nombre de voisins. Dans son étude, [Soulacroix \(2014\)](#) conclut que ces trois diagrammes sont représentatifs de la géométrie expérimentale par rapport aux critères cités précédemment.

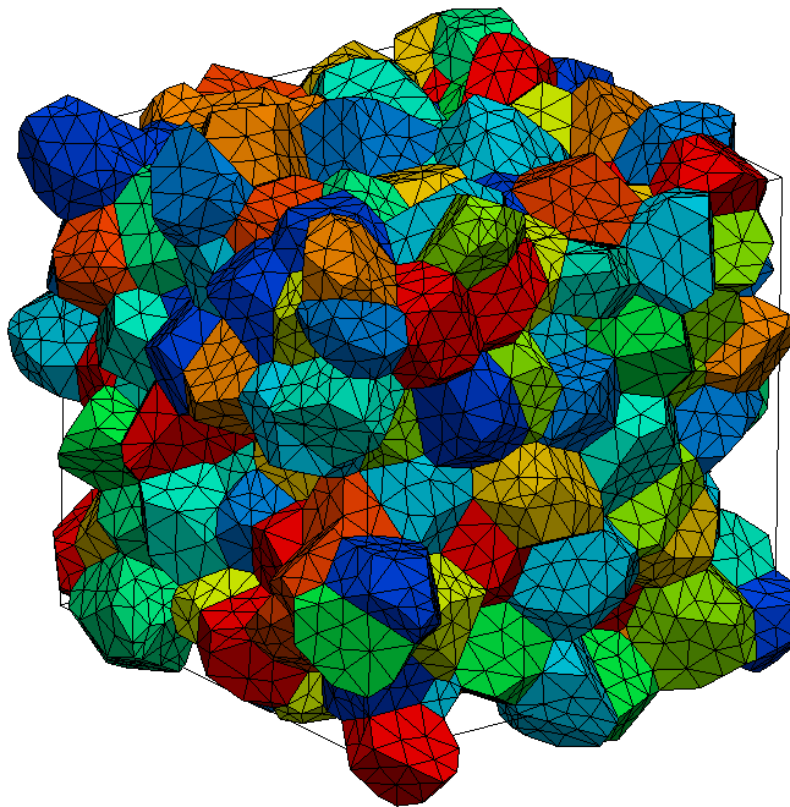


figure 5.1 : Polycristal à 300 grains généré par le code développé par [Pacull \(2011\)](#).

Par ailleurs, [Soulacroix \(2014\)](#) a également proposé deux types d'approches pour construire un pavage représentant la géométrie réelle d'un échantillon:

- utilisations des diagrammes de voronoi, laguerre ou johnson-mehl sur des germes définis suivant une mesure 2D ou 3D (EBSD par couche ou tomographie).
- création du modèle géométrique directement à partir d'une représentation discrète de la microstructure (2D ou 3D).

Dans notre cas, nous utilisons une représentation statistique de la microstructure avec un diagramme de Voronoi et un tirage aléatoire des germes avec noyau de répulsion. Compte tenu des résultats obtenus lors des études précédentes [[Pacull \(2011\)](#), [Soulacroix \(2014\)](#)] cette représentation géométrique semble suffisante pour

l'objectif de nos travaux. Le maillage EF est constitué d'éléments tétraédriques quadratiques avec dix nœuds défini avec l'option 'ELEM' 'TE10' de Cast3M.

Afin de limiter les effets de bord, et donc la taille du Volume Élémentaire Représentatif (VER), il est préférable d'utiliser des conditions aux limites périodiques [Kanit et al. (2003)] qui sont en général plus proches des conditions aux limites réels imposées par l'environnement d'un élément de volume dans un milieu hétérogène aléatoire. Pour pouvoir appliquer ces conditions aux limites périodiques sur un maillage éléments finis il faut que les nœuds des faces en vis-à-vis respectent ces mêmes conditions de périodicité. Pour cela Pacull (2011) a proposé une méthodologie consistant à générer le maillage sur une face, puis à utiliser sa copie translatée pour créer le maillage de la face périodique (voir figure 5.2).

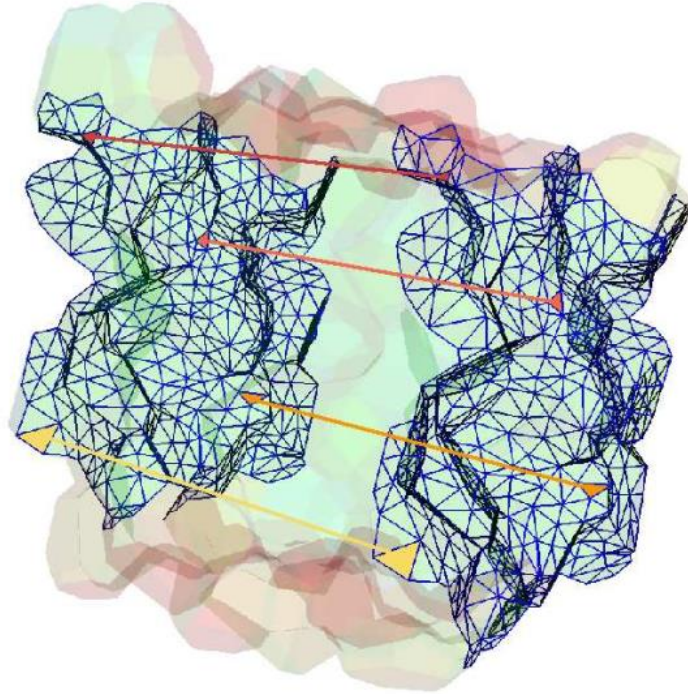


figure 5.2 : Illustration de la périodicité du maillage de deux faces en vis-à-vis face dans un VER polycristallin [Pacull (2011)].

Pour la simulation des essais de compression la sollicitation mécanique locale sur le VER sera donnée par un chargement en vitesse de déformation axiale macroscopique. Cette dernière sera égale à la vitesse de déformation axiale moyenne de la pastille $\dot{E}$ imposée aux faces supérieures et inférieures du VER à partir de la relation de liaison (5.4) avec la variation des déplacements axiaux entre les pas de temps t et $t+\Delta t$.

$$\Delta u_{z_{M2}} - \Delta u_{z_{M1}} = \Delta E . L \quad (5.4)$$

M_1 et M_2 représentent deux points périodiques en vis-à-vis et L la taille du VER.

Pour les faces latérales du VER un chargement de contrainte moyenne nulle est appliqué en respectant la condition de périodicité (5.4). En pratique ceci est réalisé avec l'ajout d'un point quelconque appelé point fantôme dont le déplacement correspond au déplacement périodique donné par la relation de ce point avec les points M_1 et M_2 décrit par l'équation (5.5) à l'aide de l'opérateur 'RELA de Cast3M. Le chargement à contrainte moyenne nulle peut ainsi être obtenu en imposant une force nulle sur le point fantôme. Dans la procédure proposée par Pacull ce point fantôme est également utilisé pour les déformations macroscopiques en imposant le déplacement périodique de la relation (5.4) au point fantôme.

$$\Delta u_{PF} = \Delta u_{M_2} - \Delta u_{M_1} \quad (5.5)$$

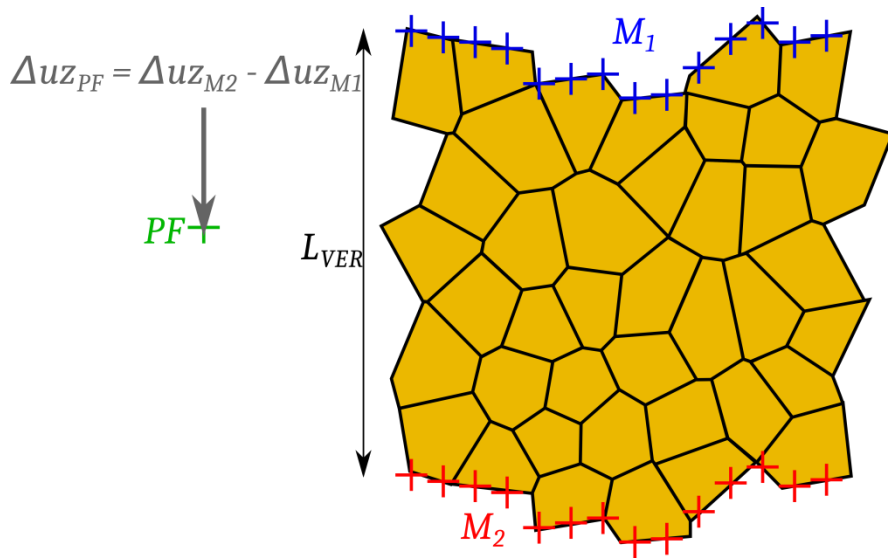


figure 5.3 : Illustration 2D de la déformation imposée entre le pas de temps t et $t+\Delta t$ sur un polycristal avec les conditions aux limites périodiques en imposant un déplacement au point fantôme PF qui est lié aux points périodiques M_1 et M_2 .

5.2.2. Choix du nombre de grain du polycristal

D'après l'expérience, le comportement élastique de la pastille est en moyenne isotrope [Martin (1989)]. Notons que conformément à ce comportement isotrope il n'est pas observé de texture du matériau avant déformation [Iltis et al. (2015)], nous retenons donc une méthode de tirage aléatoire des orientations des grains. Nous nous assurons que cette isotropie élastique est respectée sur les polycristaux en optimisant le nombre de grains utilisé par la suite pour nos simulations EF. De plus, il convient de déterminer l'effet de la variation des paramètres géométriques du polycristal (tirage des germes, tirage des orientations des grains et raffinement de maillage) sur la contrainte de compression en viscoplasticité.

Critère d'isotropie élastique

Cette étude d'isotropie élastique en fonction du nombre de grain et du tirage a été réalisée par Pacull (2011). Néanmoins, il a utilisé des constantes élastiques du matériau à 20°C, nous avons donc décidé d'actualiser ses résultats en considérant les constantes élastiques à 1100°C qui est la température où le matériau est le plus anisotrope dans la gamme de température étudiée. La technique utilisée s'inspire du rapport CEA [Castelier (2007)].

Pour vérifier l'isotrope élastique du polycristal, il faut dans un premier temps calculer le tenseur d'élasticité équivalent $\bar{\bar{\bar{C}}}_{eq}$ à l'aide de l'équation suivante :

$$\bar{\bar{\bar{C}}}_{eq} = \frac{\partial \bar{\bar{\sigma}}}{\partial \bar{\bar{\varepsilon}}} \quad (5.6)$$

Cette formulation est valable dans un cas d'élasticité linéaire en petite déformation. Pour calculer le tenseur d'élasticité équivalent il faut réaliser six calculs élastiques pour chaque composante de $\bar{\bar{\varepsilon}}$. Chaque résultat donne les composantes de $\bar{\bar{\sigma}}$ dont chacune est divisé par la valeur de ε donnant chaque composante du tenseur d'élasticité.

En convention de Voigt, le tenseur d'élasticité peut s'écrire sous forme d'une matrice 6×6 (équation (3.27) page 62). Dans la suite nous écrivons les matrices 6×6 entre crochets (par exemple $[C]$) et les matrices 3×3 en gras (par exemple $\mathbf{I}$).

Dans un deuxième temps, on calcule la matrice d'élasticité dans l'hypothèse où le matériau est isotrope. Une matrice élastique $[C_{iso}]$ peut se décomposer en parties hydrostatique et déviatorique sous la forme :

$$[C_{iso}] = K[E_1] + G[E_2] \quad (5.7)$$

avec K le module de compressibilité défini par l'équation (5.8), G le module de cisaillement défini par l'équation (5.9) tandis que les matrices 6×6 $[E_1]$ et $[E_2]$ sont données respectivement par les équations (5.10) et (5.11) :

$$K = \frac{1}{9} \sum_{i,j=1}^3 C_{ij} \quad (5.8)$$

$$G = \frac{1}{30} \left(3 \sum_{i=1}^3 C_{ii} + 6 \sum_{i=4}^6 C_{ii} - \sum_{i,j=1}^3 C_{ij} \right) \quad (5.9)$$

$$[E_1] = \begin{pmatrix} \mathbf{U} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{pmatrix} \quad (5.10)$$

$$[E_2] = \begin{pmatrix} 2I - \frac{2}{3}U & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & I \end{pmatrix} \quad (5.11)$$

Dans ces équations $I = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$ et $U = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}$.

À titre de dernière étape, nous calculons l'écart entre la matrice équivalente et la matrice isotrope pour vérifier si le comportement élastique du polycristal est proche de l'isotropie. Cet écart est représenté par le rapport à l'isotropie $R([C])$, à l'aide de l'équation (5.12), indiquant que le matériau est proche de l'isotropie si le rapport est proche de 0.

$$R([C]) = \frac{\|[C_{eq}] - [C_{iso}]\|}{\|[C_{eq}]\|} = \frac{\sqrt{\|[C_{eq}]\|^2 - \|[C_{iso}]\|^2}}{\|[C_{eq}]\|} \quad (5.12)$$

Notons que la norme d'une matrice 6×6 au carré représente le produit quadruplement contracté du tenseur d'ordre 4 avec lui-même et ce produit pour deux tenseurs quelconques $[A]$ et $[B]$ est donné en convention de Voigt en équation (5.13).

$$([A], [B]) = trace([Q] \cdot [A] \cdot [Q] \cdot [B]) \quad (5.13)$$

avec $[Q] = \begin{pmatrix} I & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & 2I \end{pmatrix}$.

5.2.3. Durcissement par interactions de dislocations dans un polycristal

Hall [Hall (1951)] suivit par [Petch (1953)] furent les premiers à proposer un modèle montrant la dépendance de la contrainte d'écoulement à la taille de grain avec la formule suivante :

$$\sigma = \sigma_0 + \frac{k}{\sqrt{d}} \quad (5.14)$$

avec σ la contrainte d'écoulement pour une déformation donnée, σ_0 la contrainte équivalente à une taille de grain infinie et k le coefficient de Hall-Petch donnant la dépendance à la taille de grain d .

Cette dépendance décroissante de la contrainte avec la taille de grain a été expliquée par un effet d'empilement des dislocations sur les JdG qui engendre un accroissement d'interactions entre dislocations.

Cet empilement a été mis en évidence par plusieurs auteurs [Pennock et Drury (2005), Valcke et al. (2006), Staiger et al. (2010), Demouchy et al. (2014), Ben Saada (2017)] montrant par exemple l'apparition de sous-joints de grains (S-JdG) à l'aide de la mesure de désorientations en EBSD. Il a été également observé que plus la déformation est élevée, plus les sous-joints sont nombreux et désorientés. Ben Saada (2017) a confirmé pour l' UO_2 , à l'aide de l'accurate-ECCI (pour Accurate-Electron Channeling Contrast Imaging), que, plus la désorientation des S-JdG est élevée, plus la densité de dislocations qui les compose est forte montrant la présence de réseau de dislocations empilées après déformation.

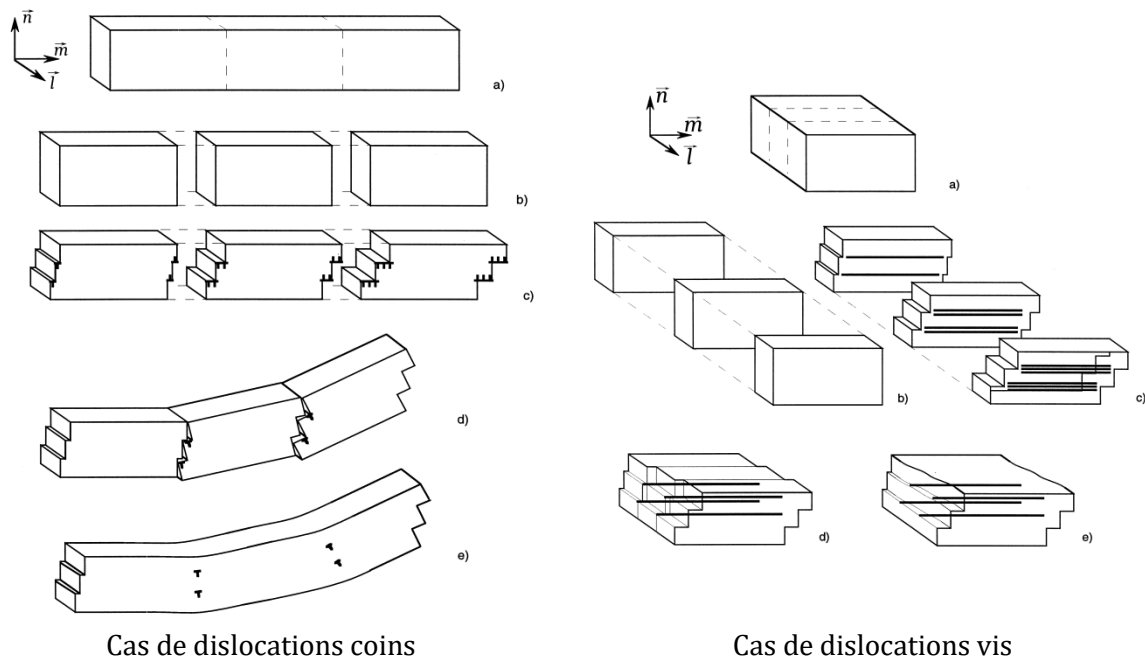


figure 5.4 : Schéma d'accumulation de GNDs d'après Arsenlis et Parks (1999).

5.2.3.1. Définition des GNDs

Considérons, une source de Frank-Read qui émet des boucles dans le matériau. Ces boucles glissant sous contrainte, l'espace entre chacune d'elle est constant. En considérant que le cristal est séparé en trois sections indépendantes (voir illustration en figure 5.4), la première boucle, ayant traversée tout le cristal, laisse un cran sur les trois sections. La deuxième boucle, ayant traversée les deux premières sections, augmente le cran en surface de ces sections mais pas celui de la troisième. Et enfin, la troisième boucle, ayant traversée seulement la première section, seul le cran de cette dernière est augmenté. En rassemblant les trois sections, comme illustré en figure 5.4, il apparaît une courbure du réseau cristallin qui est liée à l'incompatibilité des déformations induites par le glissement. Ce couple courbure-incompatibilité illustre la présence de dislocations dans le réseau appelée dislocations géométriquement nécessaires (GNDs)

[Nye (1953), Ashby (1970)]. Cette illustration a été proposée par Arsenlis et Parks (1999). Notons que suivant le caractère des dislocations qui traversent le cristal, la courbure et l'incompatibilité ne sont pas les mêmes.

5.2.3.2. Empilement et durcissement

Lorsqu'il y a prise en compte d'une interface (comme un JdG), la première dislocation arrivant proche de celle-ci est fortement ralentie. À ce moment-là, la dislocation suivante subit le champ de contrainte interne de cette dislocation, et est à son tour ralentie. Le champ de contrainte interne s'accroît du fait de la superposition des champs de contraintes de chaque dislocation et fait apparaître un empilement de dislocations dont la distance entre chacune d'elles en partant du JdG est croissante. Il y a donc présence d'un gradient de densité de GNDs avec de fortes densités proches de JdG et de plus faibles densités au centre du grain. Cette densité de dislocation stockée dans le matériau engendre du durcissement par interactions avec les dislocations mobiles par un mécanisme comparable à celui décrit au chapitre 4 avec les calculs de DD.

Dans l' UO_2 , nous avons vu au chapitre 4 que la densité de dislocations stockée, du fait d'obstacles autres que les JdG, n'a pas d'effet prépondérant sur le comportement viscoplastique des monocristaux. Ces dislocations sont généralement nommées SSD pour Statistically Stored Dislocations et sont de nature différente des GNDs. En revanche, on peut penser que les GNDs peuvent être à l'origine de l'effet de taille de grain observé dans les polycristaux d' UO_2 avec des effets d'interaction accrus du fait d'une plus forte densité de dislocations. En effet, la densité de GNDs, issue du gradient de cisaillement (cf paragraphe 5.2.4), dépend de la taille de grain et peut ainsi conduire à un durcissement du matériau similaire à celui prédit par la loi Hall-Petch (5.4) si on considère un écrouissage donné par une loi de Taylor telle que rappelée au chapitre 4. De ce fait, nous intégrons ces densités de GNDs au modèle de plasticité cristalline développé au chapitre 3 puis amélioré au chapitre 4 pour pouvoir considérer les interactions entre dislocations suivant ce qui sera présenté dans la section suivante.

5.2.4. Calcul des GNDs par éléments finis

5.2.4.1. Méthode de calcul de la densité de GNDs

Si une population de GNDs conduit localement à un vecteur de Burgers élémentaire $d\vec{b}$, la densité sur un système s est la norme quadratique du vecteur de Burgers local divisé par la norme du vecteur de Burger du matériau b .

$$\rho_{GND}^s = \frac{1}{b} \sqrt{d\vec{b}^s \cdot d\vec{b}^s} \quad (5.15)$$

Le calcul de la densité repose donc sur la détermination de ce vecteur de Burgers élémentaire.

À l'aide de l'illustration des GNDs donnée par [Arsenlis et Parks \(1999\)](#) (voir section 5.2.3) on peut mettre en évidence que la présence de GNDs se traduit par un gradient de cisaillement dans le cristal.

Par conséquent, le vecteur de Burgers élémentaire d'un ensemble de GNDs dans le système s est donné par l'équation (5.16) et peut être décomposé en une partie vis db_v^s et une partie coin db_c^s .

$$d\vec{b}^s = \vec{\nabla}(\gamma^s) = db_v^s \cdot \vec{l}^s + db_c^s \cdot \vec{m}^s \quad (5.16)$$

Ceci mène au calcul de la densité de GNDs pour les dislocations vis en équation (5.17) et pour des dislocations coins en équation (5.18). Notons ici que lors d'émission de dislocations coins, les GNDs restantes sont également coin mais de signes opposées à celles émises (voir figure 5.4) expliquant le signe négatif de l'équation (5.18).

$$\rho_{GND_v}^s = \frac{db_v}{b} = \frac{1}{b} \vec{\nabla} \gamma^s \cdot \vec{l}^s \quad (5.17)$$

$$\rho_{GND_c}^s = \frac{db_c}{b} = -\frac{1}{b} \vec{\nabla} \gamma^s \cdot \vec{m}^s \quad (5.18)$$

Finalement, en fusionnant les équations de (5.15) à (5.18), la densité de GNDs totale d'un système s est donnée par l'équation suivante :

$$\rho_{GND}^s = \sqrt{\rho_{GND_c}^s{}^2 + \rho_{GND_v}^s{}^2} \quad (5.19)$$

Ce type de description a été utilisé dans la littérature par [Evers et al. \(2004\)](#) puis [Keller et al. \(2012\)](#). Elle a l'avantage d'être simple à mettre en œuvre avec une description de la densité de GNDs vis et coin pour chaque système de glissement. C'est cette méthode que nous utiliserons dans la suite.

Autres méthodes

Afin de déterminer la quantité de GNDs dans un élément de volume on peut utiliser le contour de Burgers ∂S^* , comme illustré sur la figure 5.5. Le vecteur de Burgers équivalent $\vec{b}_{eq}$, issu de ce contour, représente une population de dislocations dans la surface considérée S . Le calcul du vecteur de Burgers équivalent est donné par l'équation suivante :

$$\vec{b}_{eq} = \iint_{S^*} d\vec{b} = \int_{\partial S^*} d\vec{x}^* \quad (5.20)$$

où $d\vec{x}^*$ représente la distance élémentaire sur le contour ∂S comme illustré sur la figure 5.5.

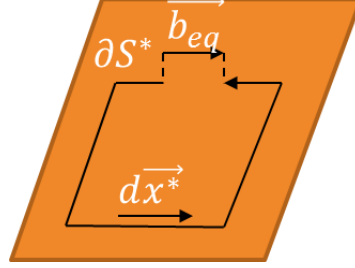


figure 5.5 : Circuit de Burgers dans la configuration déformée plastiquement

D'après la décomposition élastique-plastique du gradient de la transformation présentée en section 3.1.2 et donnée en équation (3.12) page 44, l'incompatibilité équivalente de la transformation totale peut être calculée dans la configuration de référence ou dans la configuration déformée comme illustré en figure 5.6. Alors l'équation (5.20) devient :

$$\vec{b}_{eq} = \int_{\partial S^*} d\vec{x}^* = \int_{\partial S_0} \bar{\bar{F}}^p d\vec{x}_0 \quad (5.21)$$

dans la configuration de référence car $d\vec{x}^* = \bar{\bar{F}}^p d\vec{x}_0$ ou alors :

$$\vec{b}_{eq} = \int_{\partial S} d\vec{x}^* = \int_{\partial S} \bar{\bar{F}}^e{}^{-1} d\vec{x} \quad (5.22)$$

dans la configuration déformée car $d\vec{x}^* = \bar{\bar{F}}^e{}^{-1} d\vec{x}_0$.

En utilisant le théorème de Stokes sur les équations (5.21) et (5.22), on obtient l'équation (5.23). Les rotationnels^{†††} obtenus dans cette équation représentent le tenseur de Nye $\bar{\bar{\alpha}}$ défini par Nye (1953), Ashby (1970) (voir équation (5.24)).

$$\vec{b}_{eq} = \iint_{S_0} \overline{\overline{rot}}(\bar{\bar{F}}^p)^T \cdot d\vec{S}_0 = \iint_S \overline{\overline{rot}}(\bar{\bar{F}}^e{}^{-1})^T \cdot d\vec{S} \quad (5.23)$$

^{†††} Le rotationnel se note *rot* ou *curl* ou $\nabla \times$ ou encore $\nabla \wedge$. En notation indicielle le rotationnel d'un tenseur d'ordre deux s'écrit :

$$\overline{\overline{rot}}(\bar{\bar{T}}) = R_{ij} = \varepsilon_{irs} \frac{\partial T_{js}}{\partial x_r} e_i \otimes e_j$$

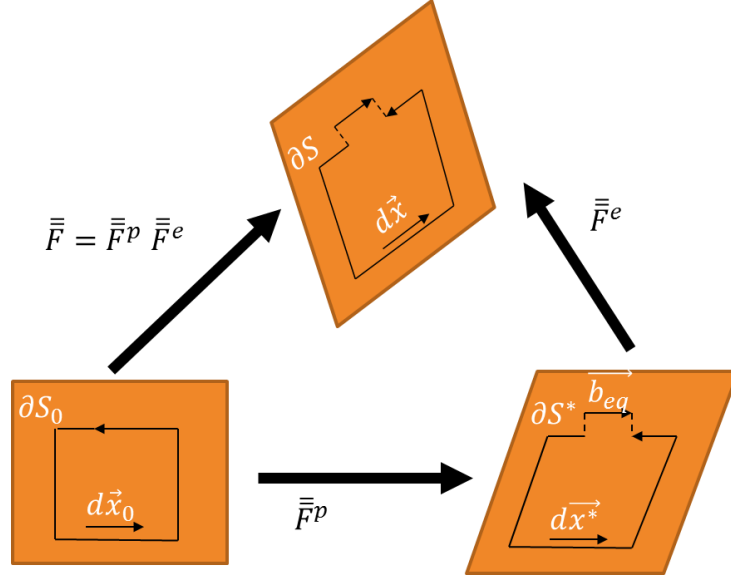


figure 5.6 : Circuit de Burgers dans toutes les configurations.

$$\bar{\bar{\alpha}} = \overline{\text{rot}}(\bar{\bar{F}}^p)^T = \overline{\text{rot}}(\bar{\bar{F}}^e)^{-1})^T \quad (5.24)$$

Le tenseur de Nye représente la relation (voir équation (5.25)) entre le vecteur de Burgers $d\vec{b}$, induit par les GNDs dans un plan d'aire unitaire, et la normale $\vec{n}$ de ce plan.

$$d\vec{b} = \bar{\bar{\alpha}} \cdot \vec{n} \quad (5.25)$$

Ainsi, le calcul de la densité de GNDs sur le système s se calcul en fusionnant les équations (5.15) et (5.25) :

$$\rho_{GND}^s = \frac{1}{b} \sqrt{(\bar{\bar{\alpha}} \cdot \vec{n}^s) \cdot (\bar{\bar{\alpha}} \cdot \vec{n}^s)} \quad (5.26)$$

Pour le calcul du tenseur de Nye, l'utilisation de $\bar{\bar{F}}^e$ ou de $\bar{\bar{F}}^p$ est à priori équivalente ce qui régit le choix c'est la configuration dans laquelle se trouve la géométrie du polycristal à la fin du calcul EF. Si la géométrie est actualisée à la fin du calcul alors on utilise $\bar{\bar{F}}^e$, dans le cas contraire, on utilise $\bar{\bar{F}}^p$. Dans les deux cas, leur calcul nécessite d'inverser des tenseurs, ce qui est très coûteux en temps de calcul. Dans une hypothèse de petites déformations et grandes rotations, le tenseur $\bar{\bar{F}}^e$ est considéré comme étant égal au tenseur des rotations élastiques $\bar{\bar{R}}^e$ sur l'hypothèse que la dilatation élastique $\bar{\bar{U}}^e = \bar{\bar{I}} + \bar{\bar{\epsilon}}^e$ est très proche de l'identité ($\bar{\bar{\epsilon}}^e \ll \bar{\bar{I}}$) [Acharya et Beaudoin (2000), Schwartz (2011), Soulacroix (2014)]. Ainsi, il n'est plus question de calculer l'inverse de $\bar{\bar{R}}^e$ mais simplement sa transposée.

$$\bar{\bar{\alpha}} = \overline{\text{rot}}(\bar{\bar{R}}^e)^T$$

En revanche, le calcul du tenseur de Nye avec le tenseur $\bar{\bar{F}}^p$ est rarement utilisé dans la littérature [Busso et al. (2000)].

5.2.4.2. Durcissement et modèle

Calcul de la densité via Cast3M et intégration dans MFront

Le calcul de ρ_{GND}^s est réalisé à chaque pas de temps par dérivation spatiale du champ de variables internes avec les opérateurs de Cast3M suivant une méthodologie similaire à celle utilisée par Schwartz (2011) et que nous rappelons ici. Ces ρ_{GND} sont donc des variables non locales dans le modèle. Dans la formulation EF du problème mécanique la loi de comportement est résolue sur les points d'intégration. Ainsi, le champ de cisaillement sur chaque système s , γ^s , est connu de façon discrète et ne peut pas être interpolé directement avec les fonctions de forme des éléments finis pour pouvoir être dérivé spatialement. Il faut dans un premier temps interpoler les valeurs aux nœuds du maillage, pour pouvoir, dans une deuxième étape, calculer le gradient. En réalisant cette dernière étape, la densité de GNDs est définie par l'opérateur gradient de Cast3M^{###} aux points d'intégration et peut être intégrée directement comme un champ non local dans MFront en surchargeant les variables internes correspondantes de la loi en début de pas de temps. Ces différentes étapes sont décrites en Annexe ...

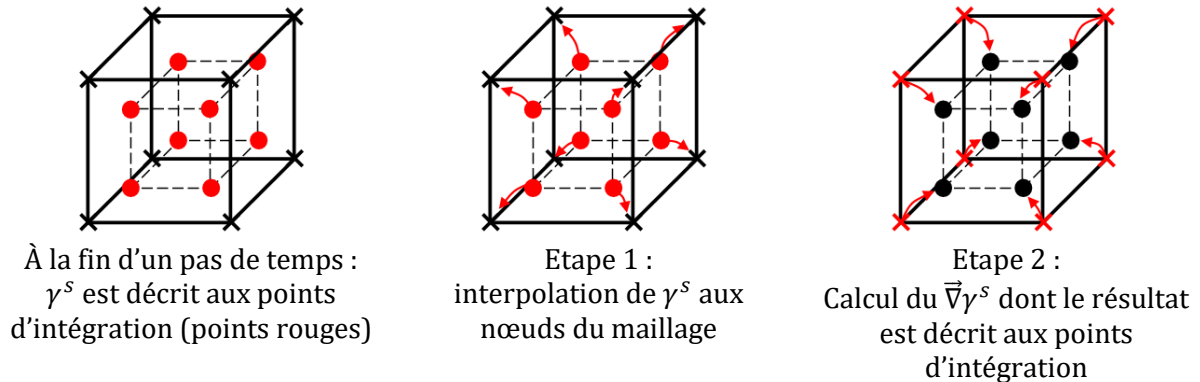


figure 5.7 : Procédure de calcul de ρ_{GND}^s à la fin du pas de temps pour pouvoir être calculée au pas de temps suivant dans le modèle (figure issue de Schwartz (2011))

Dans le chapitre 4 nous avons défini la contrainte issue de l'interaction entre les dislocations mobiles et les SSDs à partir du modèle de Franciosi (voir équation (4.4)). Ces dislocations étant négligées dans les interactions de l'UO₂, nous remplaçons le terme de densité de SSDs par celui des GNDs comme montré en équation (5.27).

^{###} La méthode d'interpolation proposée dans Cast3M correspond à une minimisation d'une quadrature de GAUSS définie par la comparaison des valeurs issues du champ interpolé aux nœuds avec les valeurs connues initialement aux points d'intégration

$$\tau_c^s = \mu b \sqrt{\sum_u a^{su} \rho_{GND}^u} \quad (5.27)$$

Cette contrainte est intégrée dans le modèle à l'aide d'une fonction exponentielle comme discuté en section 4.5.1.2 du chapitre 4 et rappelé en équation (5.28).

$$\dot{\gamma}^s = \rho_m^s b^2 v_D \exp\left(-\frac{\Delta H_0^s}{k_b T}\right) \left(\cosh\left(\frac{\tau^s}{\tau_0^s}\right) - 1\right) \exp\left(-\frac{\tau_c^s}{\tau_0^s}\right) \quad (5.28)$$

Notons que les champs de contrainte interne des dislocations appelés également « back-stress » ne sont pas intégrés dans le modèle car nous ne connaissons pas leur impact dans l'UO₂.

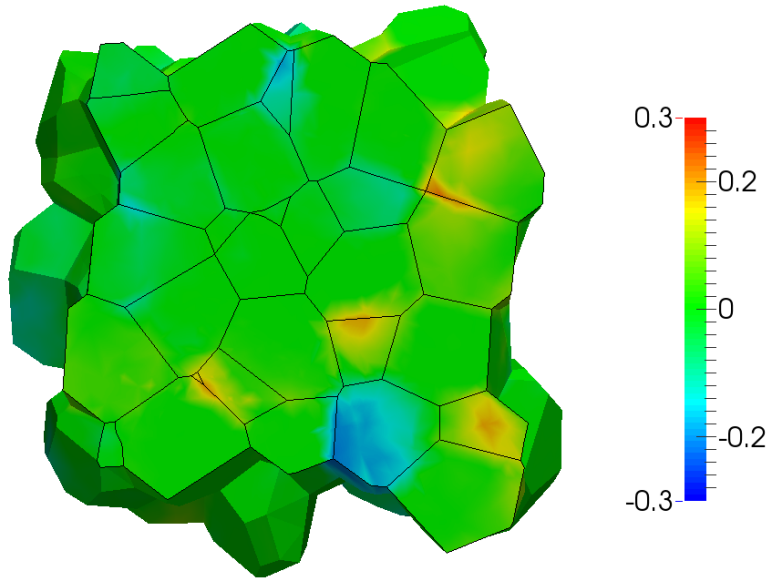
5.2.5. Modification du durcissement induit par une répartition continue des ρ_{GND}

5.2.5.1. Illustration de résultats sur polycristaux

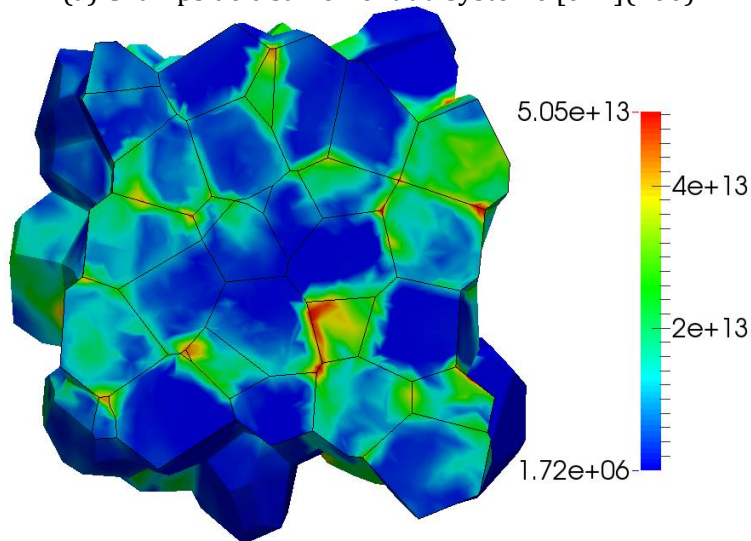
Sur la figure 5.8, nous avons tracé les champs de cisaillement et de densité de GNDs du système numéro 1 ([011](100)) obtenus pour une simulation sur un polycristal à 100 grains déformé jusqu'à 12 %. Ces illustrations montrent le lien entre ces deux grandeurs. En effet, là où le cisaillement varie au sein d'un même grain on voit apparaître des densités de GNDs. De plus, il peut être observé que la majorité des GNDs se situent proche des JdG avec toutefois quelques exceptions. En revanche, la localisation des GNDs au sein des grains ne permet pas de mettre en évidence l'apparition de S-JdG comme le montre l'expérience.

Pour illustrer ce dernier point, nous avons tracé sur la figure 5.9 l'évolution de l'orientation cristalline d'un bord à l'autre du grain après déformation viscoplastique (le grain et la ligne choisis pour tracer cette évolution sont donnés pour l'expérience et la simulation sur la figure 5.10). En effet, les S-JdG sont repérés en EBSD à partir d'une désorientation conséquente entre deux pixels voisins montrant une discontinuité dans les profils d'orientation. En traçant l'orientation dans une ligne en EBSD, on observe donc que l'orientation est constante dans toute une zone du grain puis change subitement puis est à nouveau constante. Cela nous montre bien que pour l'expérience la densité de GNDs est hétérogène et localisée sur l'épaisseur des S-JdG. Dans la simulation, l'orientation varie de façon progressive d'un bord à l'autre du grain avec une densité de GNDs plus homogène et ne permet pas de mettre en évidence de discontinuité expliquant la présence de S-JdG. Les quelques discontinuités observées sur les résultats de simulation semblent attribuables à des artefacts liés à la méthode de post-traitement qui nécessite une interpolation des points d'intégration vers les nœuds

du maillage pour pouvoir afficher l'évolution le long d'un segment. Notons que la comparaison des valeurs de désorientation données dans la simulation et l'expérience reste, à ce stade, qualitative car il s'agit de grains pris au hasard qui n'ont pas de raisons particulières d'être soumis aux mêmes sollicitations locales dans les deux cas ou d'être représentatif de la statistique moyenne de l'ensemble des grains.



(a) Champs de cisaillement du système [011](100)



(b) Champs de densité de GNDs du système [011](100)

figure 5.8 : Coupe d'un polycristal à 100 grains après une simulation de la pastille P23 dont les caractéristiques sont données en section 5.2.7 et les résultats sont commentés en section 5.3.4 (utilisation d'un $k_0 = 0.2$ avec un modèle à 2 modes de glissement)

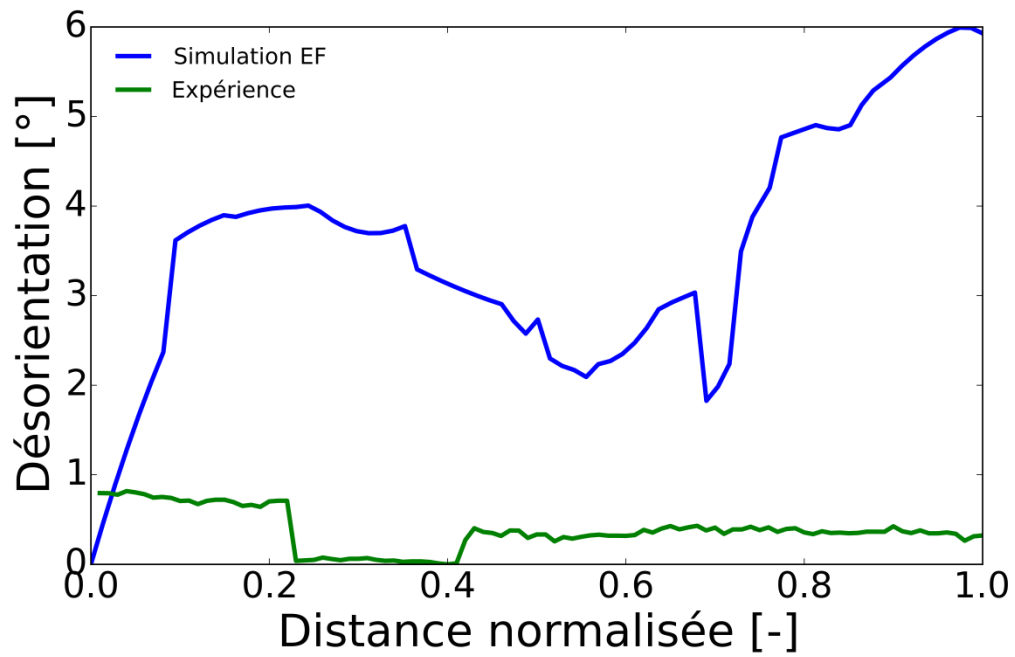
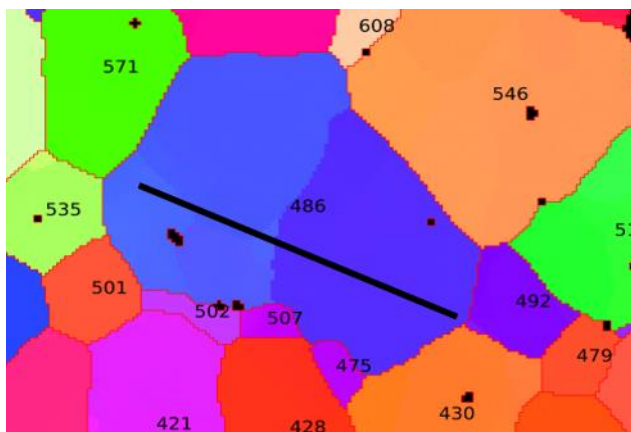
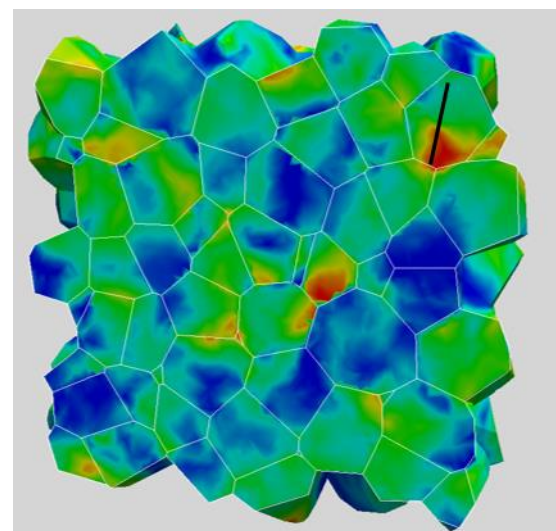


figure 5.9 : Désorientation entre l'orientation moyenne du grain et l'orientation dans la ligne donnée en figure 5.10 – Courbure continue en EF et discontinue là où il y a des S-JdG dans l'expérience.



(a)



(b)

figure 5.10 : Lignes où l'on a tracé l'évolution de l'orientation cristalline en figure 5.9 – (a) expérience – (b) simulation.

5.2.5.2. Modification du modèle pour être représentatif de la distribution spatiale hétérogène des GNDs

Dans ce paragraphe, nous analysons l'impact de la répartition des GNDs sur le durcissement induit par l'interaction entre dislocations. Cette analyse a pour objectif de corriger la loi de durcissement afin de compenser les différences calculs-mesures observées sur l'hétérogénéité des GNDs.

La figure 5.11 illustre de manière simplifiée les deux cas de cisaillement (expérience et EF) d'un système u dans la direction de glissement du système s notée $\vec{x}$. Dans l'expérience, le cisaillement est composé de plusieurs palliés montrant successivement le changement d'orientation. La densité de GNDs étant liée au gradient de cisaillement celle-ci s'organise en n bandes de largeur l . Pour simplifier l'exemple choisi, nous considérons que la densité et la largeur du S-JdG sont toujours constantes.

En considérant que notre modèle prédit bien le cisaillement mais de manière continue sur une distance totale L , on obtient un cisaillement moyen équivalent dans les deux cas. La densité moyenne de GNDs sur la ligne est également équivalente dans les deux cas :

$$\overline{\rho_{GND}^u} = \overline{\rho_{GND}^u}(\text{exp}) = \frac{nl}{L} \rho_{GND}(\text{exp}) = \overline{\rho_{GND}^u}(\text{EF}) = \rho_{GND}(\text{EF}) \quad (5.29)$$

avec $\overline{\rho_{GND}^u}$ faisant référence à une densité moyenne sur toute la distance L , et les termes exp et EF faisant références aux données issues de l'expérience ou des éléments finis respectivement.

En appliquant la loi de la forêt sur la densité de GNDs locale pour calculer le durcissement moyen dans le cas expérimental on obtient l'équation (5.30).

$$\overline{\tau_c^{su}}(\text{exp}) = \frac{nl}{L} \tau_c^{su} = \frac{nl}{L} \mu b \sqrt{a^{su} \rho_{GND}^u(\text{exp})} \quad (5.30)$$

Dans le cas de l'expérience, la densité étant constante dans chaque bande, la contrainte critique moyenne se déduit donc de la moyenne des contraintes critiques des n bandes.

En utilisant l'équivalence des densités locales de GNDs homogène-hétérogène donnée par l'équation (5.29) dans l'équation (5.30) on obtient l'équation (5.31). Cette dernière montre que le durcissement moyen expérimental peut être déduit de la densité locale calculée par EF corrigée du coefficient $L/(nl)$.

$$\overline{\tau_c^{su}}(\text{exp}) = \frac{nl}{L} \mu b \sqrt{a^{su} \rho_{GND}^u(\text{EF}) \times \frac{L}{nl}} \quad (5.31)$$

Ainsi, pour calculer la bonne contrainte critique moyenne en EF, il faut considérer la correction suivante de la loi de durcissement dans le calcul EF :

$$\tau_c^s = \sqrt{\frac{nl}{L}} \mu b \sqrt{\sum_u a^{su} \rho_{GND}^u} = k_0 \mu b \sqrt{\sum_u a^{su} \rho_{GND}^u} \quad (5.32)$$

N'ayant pas de données sur les paramètres n , l et L , nous considérerons dans le modèle un seul paramètre qui doit être ajusté : $k_0 = \sqrt{\frac{nl}{L}}$. Ce paramètre d'ajustement est également présent dans l'étude [Schwartz \(2011\)](#) mais aucune signification n'a été introduite dans son cas.

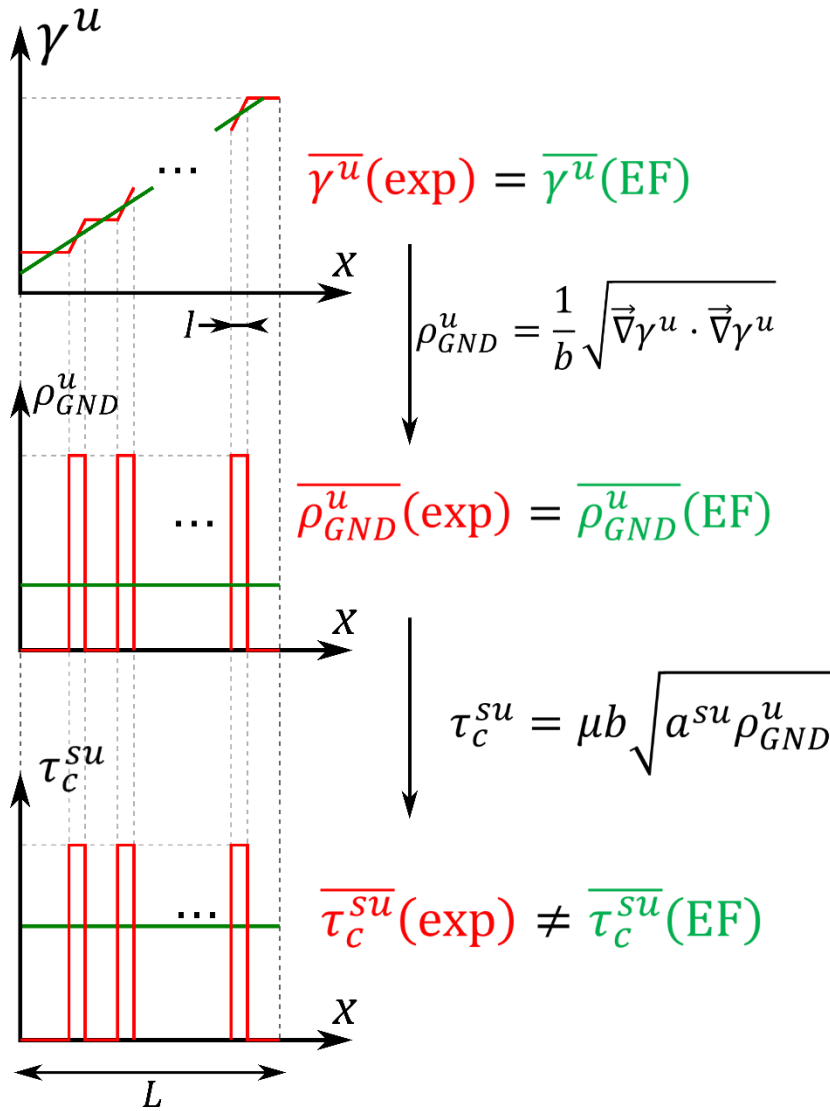


figure 5.11 : Illustration de la différence obtenue en termes de répartition continue ou discontinue des GNDs sur le modèle de durcissement utilisé

5.2.6. Méthode de comparaison calcul-mesure de la courbure du réseau cristallin

Afin de valider les hétérogénéités de déformation, nous pouvons utiliser la mesure de courbure du réseau cristallin. En effet, expérimentalement, nous n'avons pas directement accès aux déformations locales dans les grains mais nous pouvons y remonter indirectement grâce à la courbure du réseau cristallin mesurée à l'aide de l'EBSD. De même, les données de densité de GNDs peuvent se comparer à partir de l'étude de la courbure.

Pour comparer les résultats de simulation sur un polycristal 3D avec une cartographie EBSD 2D, il faut s'affranchir des différents problèmes de représentativité statistique des grandeurs calculées. La méthode de mesure utilisée doit répondre aux deux points suivants :

- indépendance à la taille de grain pour permettre une transposition 2D-3D,
- échantillon statistique calculé suffisant en regard de la statistique expérimentale.

La mesure EBSD donne les trois angles d'euler du repère cristallin en chaque pixel d'une grille 2D. À l'aide des techniques données en Annexe D de la thèse de [Ibrahim \(2015\)](#), il est possible de calculer la désorientation entre deux pixels i et j de cette grille à partir de la norme euclidienne de la matrice de rotation permettant de passer du repère cristallin du premier pixel au second pixel. La transformation de rotation est définie avec la plus petite rotation permettant de passer du repère d'un pixel à un autre.

La technique utilisée pour comparer la simulation et l'expérience en s'affranchissant de la répartition de la taille de grain est de définir une classe de distance caractéristique $c_d = [d_1 ; d_2]$ dans chaque grain composé de N pixels. Ainsi, pour chaque pixel i , on détermine les N_i couples de pixels (i, j) dont la distance d_{ij} est comprise dans la classe définie $d_{ij} \in [d_1 ; d_2]$ tel qu'illustré sur la figure 5.12. Pour chacun de ces couples, nous calculons la désorientation $\Delta\theta_{ij}$ et calculons la valeur moyenne de désorientation entre le pixel i et l'ensemble des pixel j situés à une distance caractéristique donnée. On répète l'opération pour chaque pixel i d'un même grain pour calculer une désorientation moyenne propre au grain et représentative d'une classe de distance donnée.

Pour résumé, on dispose, pour un pixel i donnée de N_i valeurs de désorientation $\Delta\theta_{ij}$ issues des couples de pixels dont la distance qui les sépare d_{ij} est comprise entre d_1 et d_2 . On calcule finalement la valeur moyenne de cette désorientation, sur l'ensemble des pixels i , qui représente la désorientation moyenne pour une distance donnée dans un grain :

$$\overline{\Delta\theta}_{[d_1;d_2]} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{1}{N_i} \sum_j^{N_i} (\Delta\theta_{ij} \forall (i,j), d_{ij} \in [d_1; d_2]) \quad (5.33)$$

Finalement, pour pallier les problèmes liés à la transposition 2D 3D et à l'analyse d'un nombre de grains suffisant, nous avons décidé d'analyser les résultats de simulation 3D dans des plans de coupe XoZ et YoZ (avec Z l'axe de compression). En pratique on projette les résultats 3D sur plusieurs grilles 2D à partir des opérateurs de Cast3M qui permettent d'interpoler les orientations calculées au point d'intégration sur les nœuds du maillage 3D puis de les projeter sur les grilles 2D. Ce choix permet ainsi d'avoir une analyse des résultats de simulation conforme à l'expérimental avec une mesure 2D sur un nombre de grains plus important que la centaine de grains du polycristal 3D. Notons que nous avons également calculé la désorientation moyenne (5.33) en prenant les valeurs d'orientation directement aux points d'intégration et en considérant les couples de points dans l'ensemble des directions de l'espace. Les résultats obtenus sont quasiment identiques aux résultats avec quadrillage 2D.

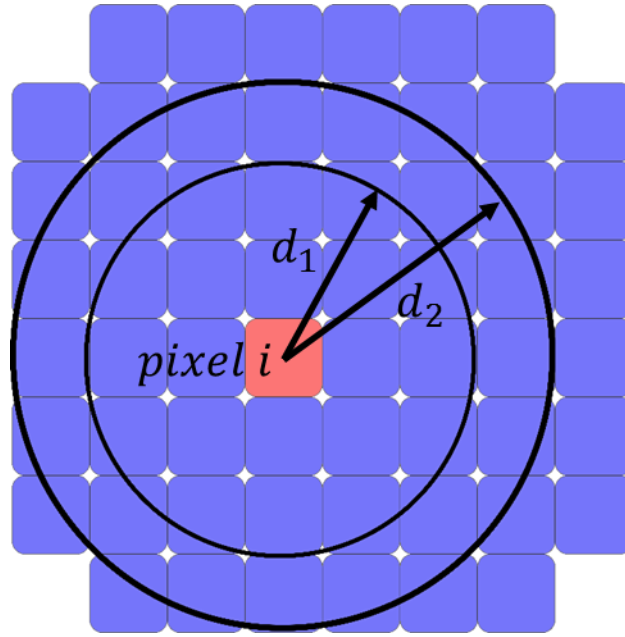


figure 5.12 : Schéma d'un grain pixelisé pour illustrer le choix de l'ensemble des pixels j qui se situent à une distance du pixel i entre d_1 et d_2

5.2.7. Essais de référence et méthode de comparaison simulation-expérience

Pour les besoins de notre étude, nous nous sommes focalisés sur les essais de [Guerin \(1975\)](#), [Salvo \(2014\)](#) et [Ben Saada \(2017\)](#). L'étude de Guérin considère le comportement viscoplastique de l'UO₂ pour des sollicitations de transitoire de puissance incidentel induisant de la compression à des vitesses de déformation $\dot{\epsilon} \in [10^{-5} ; 10^{-3}] \text{ s}^{-1}$ et des températures $T \in [1100 ; 1700] \text{ }^\circ\text{C}$. [Salvo \(2014\)](#) considérait les transitoires de

puissance d'un accident d'insertion de réactivité (RIA pour Reactivity Initiated Accident) induisant de la compression avec de fortes vitesses de déformation $\dot{\epsilon} \in [10^{-4}; 10^{-1}] \text{ s}^{-1}$ et des températures $T \in [1100; 1700] \text{ }^{\circ}\text{C}$. Enfin, [Ben Saada \(2017\)](#) a réalisé des essais à 1500°C pour des vitesses entre 10^{-6} et 10^{-4} s^{-1} . Les caractéristiques de leurs essais sont données dans le tableau 5.1.

Sur la figure 5.13, nous avons représenté les données de vitesse de déformation des trois auteurs en fonction de la contrainte pour plusieurs températures. Il apparaît qu'en termes de contrainte, les données de [Guerin \(1975\)](#) sont supérieures à celles des autres auteurs à température et vitesse identique. Cela est probablement dû à la taille de grain plus faible de ses échantillons qui conduit à un accroissement des contraintes dans le domaine du fluage dislocation. Les données de [Salvo \(2014\)](#) et de [Ben Saada \(2017\)](#), quant à elles, ont des contraintes proches pour des vitesses de déformation équivalentes. Si la contrainte est légèrement plus faible pour les données de Salvo, c'est probablement à cause de la température légèrement plus élevée et la densité du matériau légèrement plus faible.

tableau 5.1 : Récapitulatif des données des essais de [Guerin \(1975\)](#), [Salvo \(2014\)](#) et [Ben Saada \(2017\)](#)

	Guerin (1975)	Salvo (2014)	Ben Saada (2017)
		Lot de faible densité	Lot L1 à forte porosité intra-granulaire
$\dot{\epsilon} \text{ (s}^{-1}\text{)}$	$10^{-5} - 10^{-3}$	$10^{-4} - 10^{-1}$	$10^{-6} - 10^{-4}$
T (°C)	1100 - 1700	1100 - 1700	1500
Géométrie des échantillons	$\varnothing = 4\text{mm}$ et $h = 7\text{mm}$	$\varnothing = 8,2\text{mm}$ et $h = 12\text{mm}$	$\varnothing = 8,19 \pm 0,13$ $h = 16,3 \pm 0,13$
Taille de grain d (μm)	5	10	12
Rapport O/U	2,0000 - 2,0015	2,0	2,0
Densité (%)	$94 \pm 0,5$	$96,4 \pm 0,3$	$98,1 \pm 0,06$
Fraction surfacique de pores (%)		$5,2 \pm 0,6$	2,5%
Répartition de la porosité en nombre (%)	environ 50% intra environ 50% inter	87 % intra 13 % inter	93% intra 7% inter
Répartition surfacique de pores (%)		20% intra 80%inter	72 % intra 23 % inter
Taille de pores (μm)	quelques dizaines	0,4 intra 2,1 inter	0,37 intra 0,88 inter
Impuretés (p.p.m)	Ag < 0,5 Al < 20 B < 0,1 Cd < 0,5 Cr < 4 Cu < 5 Fe = 20 Mg < 2 Mn < 2	Pd < 3 Ni < 4 Si = 30 Be < 0,5 K < 20 Na < 5 Ca = 20 Ba < 100	

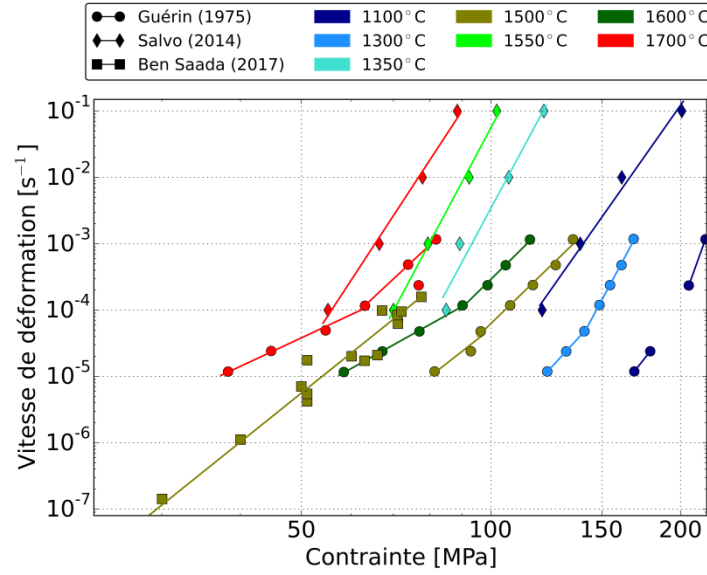


figure 5.13 : Vitesse de déformation en fonction de la contrainte pour différentes température - Comparaison des données de [Guerin \(1975\)](#), [Salvo \(2014\)](#) et [Ben Saada \(2017\)](#).

Concernant, la dépendance de la vitesse de déformation à la contrainte, on voit que les données ont des pentes (dans le graphe *log-log*) plus élevées pour les données de [Salvo \(2014\)](#). Cela doit être lié aux fortes vitesses de déformation. De manière générale, les pentes diminuent en fonction de la température. Pour illustrer plus clairement ce propos, nous avons tracé dans la figure 5.14 l'exposant n d'une loi puissance, représentant la dépendance de la vitesse de déformation à la contrainte, pour chacune des données expérimentales. Rappelons que plus l'exposant est élevé, plus la dépendance est forte, c'est-à-dire que pour une variation de contrainte donnée, plus l'exposant est grand, plus la variation de vitesse est grande. Pour calculer cet exposant de contrainte nous utilisons une régression linéaire dans l'espace *log-log* pour une température donnée en utilisant la formule suivante :

$$\log(\dot{\epsilon}) = k + n \times \log(\sigma) \quad (5.34)$$

ce qui correspond à la loi puissance suivante :

$$\dot{\epsilon} = e^k \cdot \sigma^n \quad (5.35)$$

Le tracé de cet exposant de contrainte n en fonction de la température montre que plus la température est élevée plus la dépendance à la contrainte est faible. De plus, il semblerait que plus la vitesse de déformation est élevée, plus l'exposant de contrainte est élevé expliquant probablement les pentes plus élevées des données de [Salvo \(2014\)](#). Cependant, les vitesses pour ces dernières sont tellement élevées que nous émettons des réserves sur l'interprétation de ces résultats car c'est un domaine de vitesse qui n'a pas été largement étudié et pour lesquels nous ne sommes pas certains des mécanismes de viscoplasticité impliqués. De plus, il apparaît sur ces essais que certains échantillons

présentaient de l'endommagement avec des fissures et des ruptures. C'est d'ailleurs très souvent le cas à 1100°C où les données de Salvo ne sont plus en cohérence avec les autres auteurs en termes de contrainte et d'exposant. Nous avons donc décidé de ne pas considérer les données de [Salvo \(2014\)](#) pour les essais à la température de 1100°C.

À titre de dernière comparaison, nous regardons la dépendance de la vitesse de déformation à la température. Pour cela, nous calculons l'énergie d'activation apparente à contrainte donnée présente dans une loi d'Arrhénus (équation (2.6) page 22) et calculée à partir de l'équation suivante :

$$\Delta H = -k_b \frac{\Delta \log(\dot{\epsilon})}{\Delta \left(\frac{1}{T}\right)}_{\sigma=cste} \quad (5.36)$$

Ainsi, pour chaque température des données expérimentales, nous choisissons le point qui a la vitesse la plus faible, ensuite nous relevons la contrainte afin de calculer la vitesse correspondante pour une température plus élevée (méthode illustrée en figure 5.16). Pour cela, nous utilisons la loi puissance déterminée précédemment pour chaque température avec l'équation (5.35).

L'énergie calculée donne la sensibilité à la température pour une contrainte donnée donc plus ΔH est grand, plus la vitesse est sensible à la température, c'est-à-dire que pour une variation de température donnée, plus ΔH est grand, plus la variation de vitesse est forte.

Les résultats de l'énergie d'activation en fonction de la contrainte sont donnés en figure 5.15. N'ayant qu'une seule température pour les données de [Ben Saada \(2017\)](#), nous ne pouvons pas déterminer cette énergie d'activation. De même, nous n'avons pas tracé les données de [Salvo \(2014\)](#) car nous ne connaissons pas les mécanismes impliqués qui pourraient avoir un effet trompeur sur l'énergie. Les résultats montrent que l'énergie diminue avec la contrainte donnant une dépendance décroissante et non linéaire à la température.

Les données caractéristiques des essais de [Ben Saada \(2017\)](#) avec lesquels nous comparons les courbes contrainte-déformation et la courbure du réseau en fin d'essai sont données dans le tableau 5.2. Comme nous l'avons décrit dans la section précédente, la comparaison de la courbure se fait à partir des clichés EBSD réalisées par [Ben Saada \(2017\)](#). Un exemple de cliché est donné en figure 5.17. Dans cette cartographie, les traits blancs représentent les JdG qui d'après la légende sont repérés lorsque des pixels voisins ont une désorientation supérieure à 5°. Les traits de couleurs représentent les S-JdG dont la désorientation est inférieure à 5°.

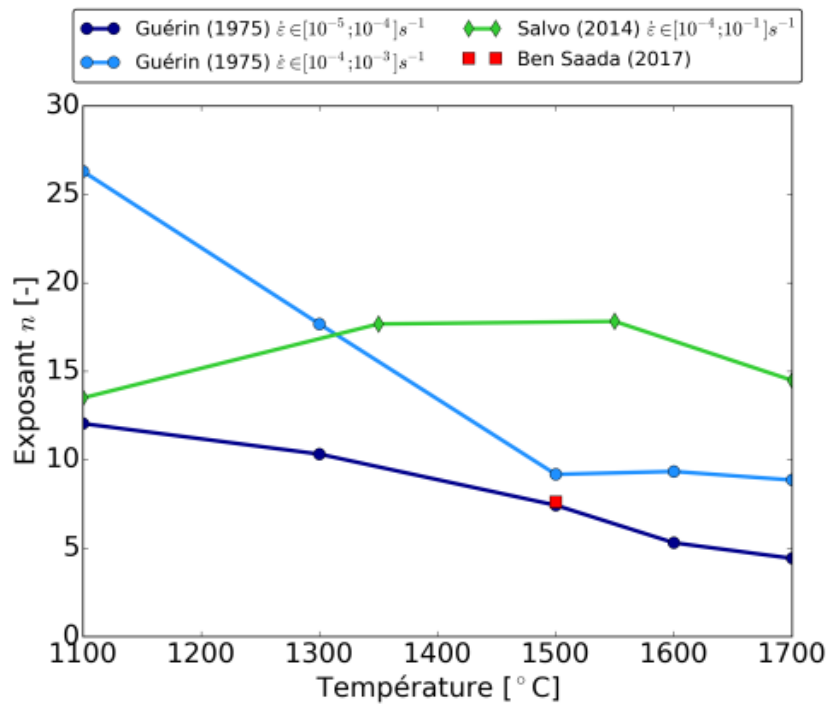


figure 5.14 : Exposant de contrainte n en fonction de la température - Comparaison des données de [Guerin \(1975\)](#), [Salvo \(2014\)](#) et [Ben Saada \(2017\)](#)

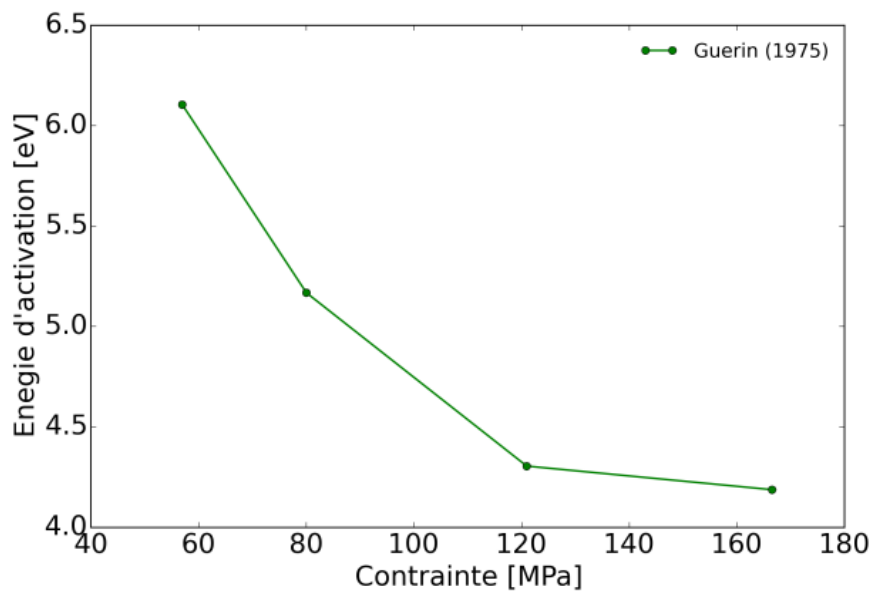


figure 5.15 : Énergie d'activation en fonction de la contrainte relative aux données expérimentales de [Guerin \(1975\)](#) et [Salvo \(2014\)](#).

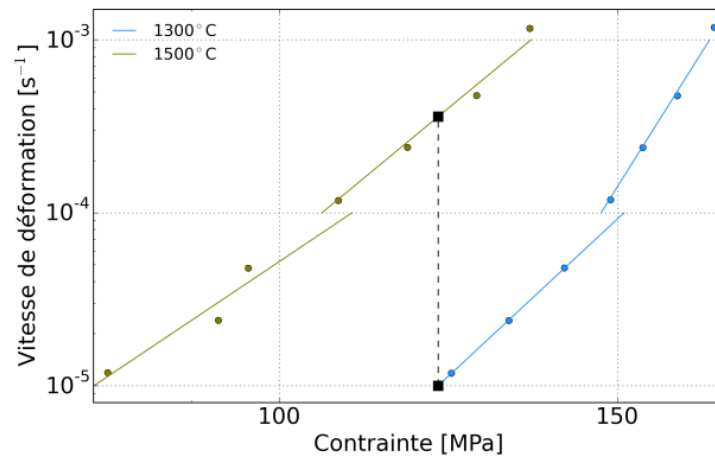


figure 5.16 : Technique de détermination de l'énergie d'activation pour Guérin entre 1300 et 1500°C. On récupère Dans un premier temps la valeur de contrainte à 1300 °C pour une vitesse de 10^{-5} s^{-1} . Dans un second temps, on récupère la valeur de contrainte pour une température plus élevée (ici 1500°C) en utilisant l'équation (5.34).

tableau 5.2 : Caractéristique des essais mécaniques réalisés par [Ben Saada \(2017\)](#).

N° de pastille	Nature de l'essai	Vitesse de déplacement de la traverse [$\mu\text{m} \cdot \text{min}^{-1}$]	Vitesse de déformation [s^{-1}]	Niveau de déformation moyen final [%]	Durée de l'essai
P25	DVC	20	$1,79 \cdot 10^{-5}$	12	2h
P30	DVC	70	$6,39 \cdot 10^{-5}$	11	30 min
P23	DVC	100	$8,33 \cdot 10^{-5}$	11	23 min

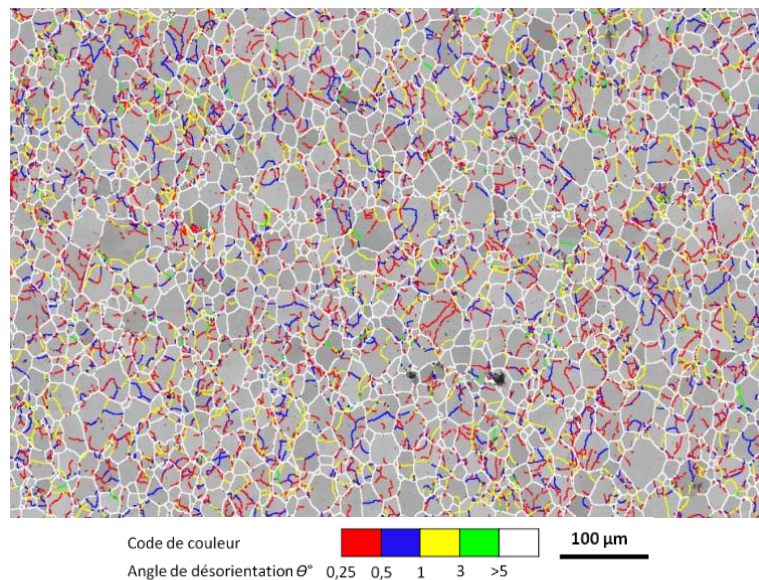


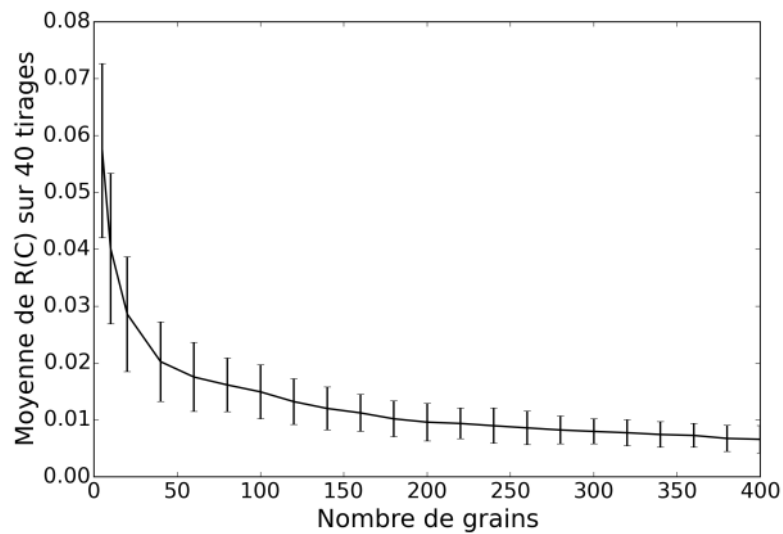
figure 5.17 : Cartographie EBSD réalisée après déformation sur la pastille P23 [[Ben Saada \(2017\)](#)].

5.3. Résultats

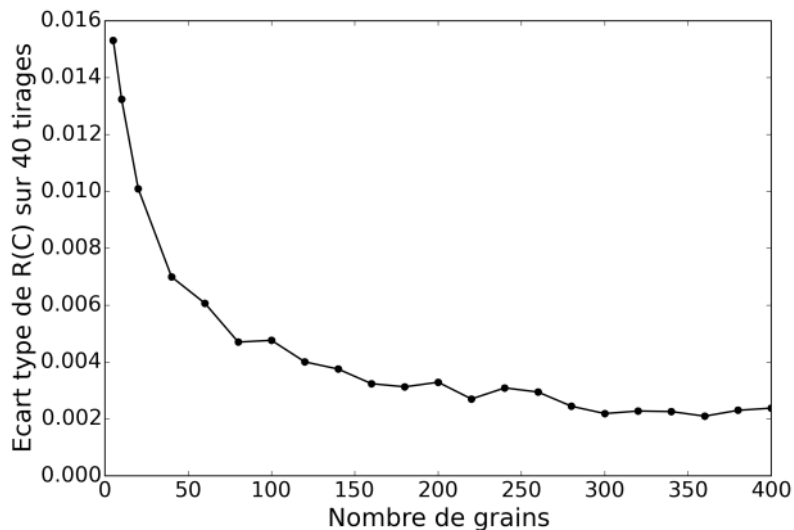
5.3.1. Choix du nombre de grain du polycristal

Comme nous l'avons expliqué dans la section 5.2, nous déterminons ici le nombre minimum de grains nécessaires afin d'assurer l'isotropie élastique du polycristal ainsi que de minimiser les variations de contrainte en viscoplasticité pour différents tirages de germes et d'orientations.

5.3.1.1. Isotropie élastique



(a)



(b)

figure 5.18 : Étude d'isotropie élastique du polycristal en fonction du nombre grain et du nombre de tirage. (a) rapport d'isotropie élastique en fonction du nombre de grain – (b) écart type du rapport d'isotropie sur 40 tirages en fonction du nombre de grain.

Nous avons effectué des essais de compression dans le régime élastique sur 40 tirages de polycristaux et d'orientations, et sur des nombres de grain entre 5 et 400. Les résultats obtenus sont résumés sur la figure 5.18. D'un côté, on voit que le rapport d'isotropie $R(C)$ moyen sur 40 tirages est compris entre 1 et 7 %. Ce rapport diminue fortement jusqu'à environ 50 grains puis diminue doucement jusqu'à 400 grains. D'autre part, l'écart type semble suivre la même tendance où l'on voit que plus le nombre de grains est grand plus l'écart type du rapport d'isotropie sur 40 tirages diminue. Cette fois, il diminue très fortement jusqu'à 100 grains puis diminue doucement jusqu'à 400 grains.

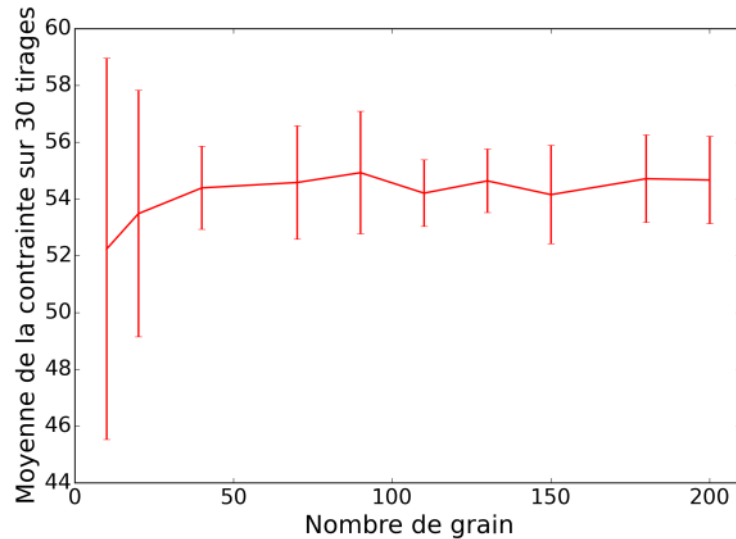
Pour conclure, il semble que 100 grains soit suffisant pour avoir un matériau élastiquement proche de l'isotropie.

5.3.1.2. Sensibilité de la contrainte de compression au tirage de VER dans le domaine viscoplastique

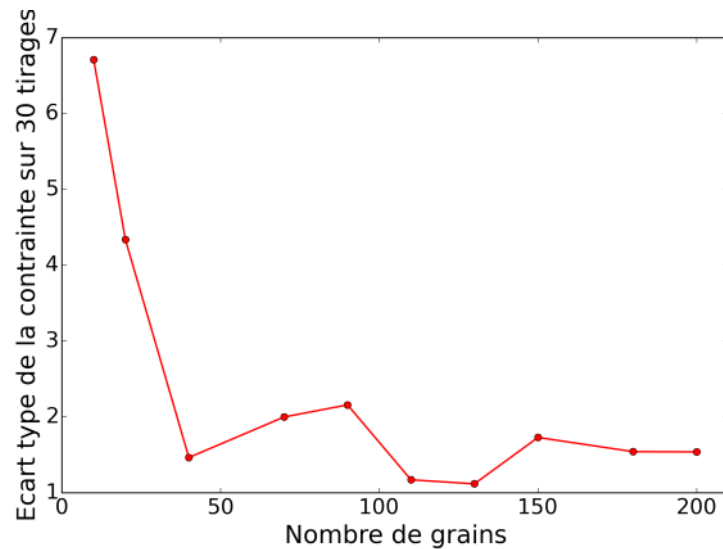
Dans ce paragraphe, nous avons utilisé un modèle ne comportant que les systèmes $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{100\}$ et $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{110\}$ (voir modèle section 3.1.3 page 48). Cependant, cette étude ayant été réalisée avant l'identification des paramètres du modèle dans la section 3.2.3 page 55, les contraintes présentées ici ne sont peut-être pas rigoureusement les mêmes que celles obtenues avec les bons paramètres. Ceci ne devrait pas affecter les conclusions sur l'analyse de sensibilité au tirage.

Dans le cadre de cette étude, nous avons réalisé 30 essais de compression par nombre de grain jusqu'à 5% de déformation à 1100°C. Ces 30 essais représentent 3 tirages de germes différents et 10 tirages d'orientations. Les résultats de contrainte de compression en fonction du nombre de grain et du nombre de tirage sont donnés dans la figure 5.19. La première figure montre que la contrainte moyenne atteint une asymptote proche de 50 grains. La deuxième montre également qu'une asymptote est atteinte pour 50 grains, par contre entre 50 et 200 grains l'écart type varie entre 1 et 2 MPa. Cette fluctuation est potentiellement due à un nombre de tirage insuffisant pour capturer un écart type asymptotique. Cependant, elle est suffisamment faible pour s'assurer que l'on est proche de la valeur asymptotique, en tout cas au-dessus de 100 grains.

Pour conclure, utiliser des polycristaux de 100 grains est suffisant pour être précis en termes d'isotropie élastique et éviter de trop forte fluctuation de la contrainte en fonction du tirage utilisé. Ces fluctuations paraissent raisonnables pour la réalisation de notre étude compte tenu du compromis temps – précision.



(a)



(b)

figure 5.19 : Contrainte de compression du polycristal en fonction du nombre grain et du nombre de tirage. (a) contrainte de compression en fonction du nombre de grain – (b) écart type de la contrainte de compression sur 30 tirages en fonction du nombre de grain

5.3.2. Sensibilité de la contrainte au raffinement de maillage

Pour définir le raffinement de maillage optimal une étude de sensibilité à la taille de maille a également été réalisée. Pour cela nous avons simulé des essais de compression à 2% de déformation à 1500°C et 10^{-4} s^{-1} . Dans ce cas, les tirages de germes et d'orientations sont les mêmes, seul le nombre de nœuds varie. Le résultat de cette étude est donné sur la figure 5.20 et montre que la variation de contrainte reste faible (de l'ordre des fluctuations observées pour les différents tirages au-delà de 100 grains) sans pour autant pouvoir mettre en évidence une convergence en maillage.

Malheureusement, nous ne pouvons pas dépasser les 50.10^3 nœuds car nous n'avons pas les moyens informatiques pour faire converger les calculs avec plus de nœuds. Ainsi, nous considérons que le cas à 27.10^3 nœuds offre un bon compromis avec une contrainte assez proche du maillage le plus raffiné que l'on puisse réaliser (50.10^3 éléments).

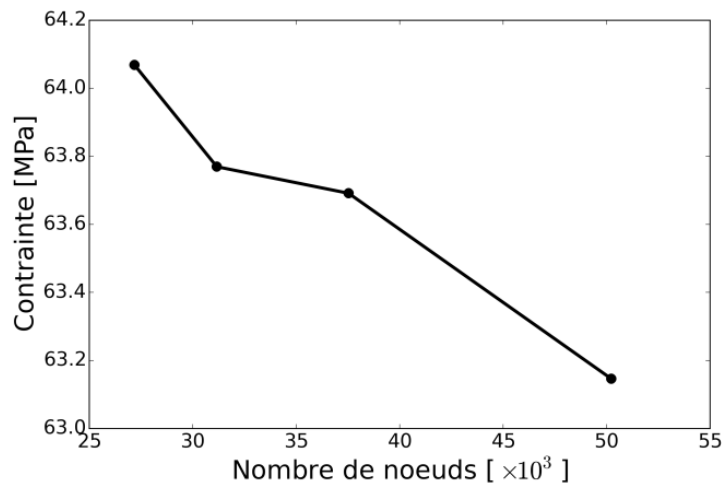


figure 5.20 : Étude de sensibilité au raffinement de maillage d'un polycristal à 100 grains à 2% de déformation à 1500°C et une vitesse de 10^{-4} s^{-1}

5.3.3. Sensibilité de la vitesse de déformation à la contrainte et à la température

5.3.3.1. Comparaison simulation-expérience

Dans ce paragraphe, nous comparons l'effet de la contrainte et de la température sur la vitesse de déformation entre la simulation et l'expérience. Notons que nous ne comparons pas, à ce stade, les niveaux de contrainte car l'effet de la taille de grains lié à la densité des GNDs (5.2.4) n'a pas encore été introduit dans ces premiers calculs. Ainsi, les contraintes sont, en général, plus faibles pour la simulation par rapport aux données expérimentales comme le montre la figure 5.21.

Sur cette dernière il semblerait que les pentes obtenues en simulation sont comparables à celles des différentes expériences. Cela est confirmé sur la figure 5.22 qui montre que l'exposant de contrainte n est comparable entre la simulation et les données expérimentales. Sur cette figure on constate également que l'exposant apparent est inversement proportionnel à la température et proportionnel à la vitesse de déformation.

Dans un second temps, nous avons tracé en figure 5.23, l'évolution de l'énergie d'activation apparente en fonction de la contrainte pour comparer celle obtenue sur les

essais de Guérin avec celle qui nous obtenons dans notre simulation ne considérant que les deux premiers modes de glissement : $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle\{100\}$ et $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle\{110\}$. Il apparaît que les valeurs obtenues sont en moyenne équivalente et proche de 5 - 5,5 eV. Cependant, la sensibilité de la contrainte sur l'énergie d'activation apparente est sous-estimée. Cela se traduit par une dépendance de la vitesse de déformation proche de l'expérience mais dont les écarts peuvent varier suivant la contrainte.

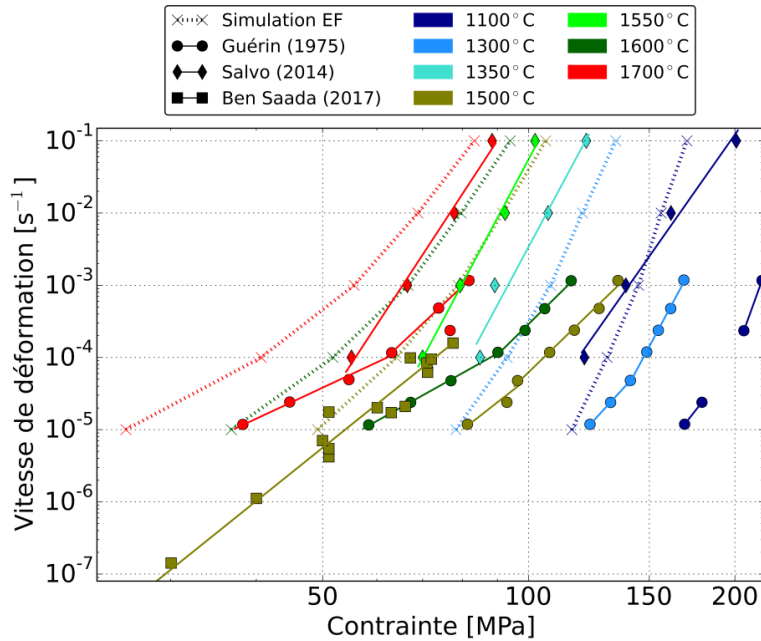


figure 5.21 : Vitesse de déformation en fonction de la contrainte pour différentes températures - Comparaison simulation-expérience avec un modèle ne considérant pas les GNDs et avec les modes $\{100\}$ et $\{110\}$.

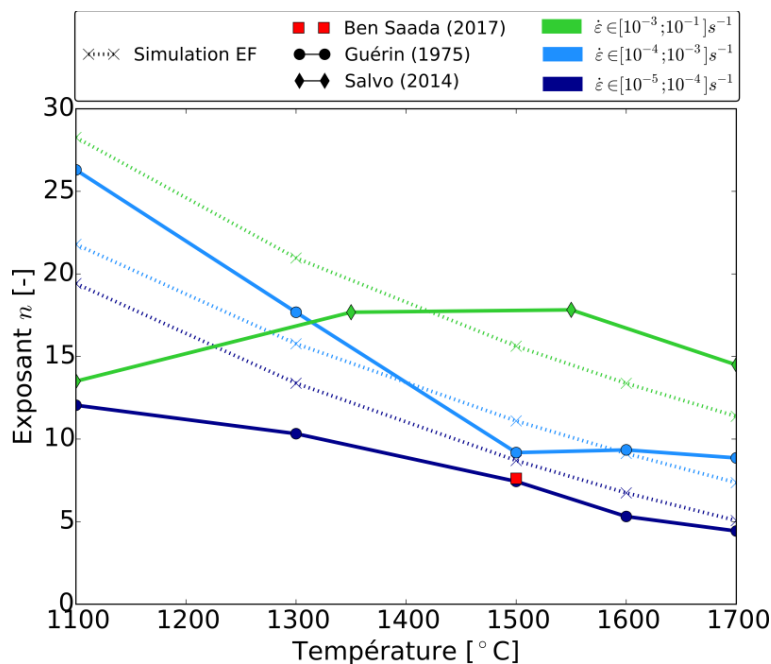


figure 5.22 : Exposant de contrainte n en fonction de la température - Comparaison simulation-

expérience avec un modèle ne considérant pas les GNDs et avec les modes $\{100\}$ et $\{110\}$.

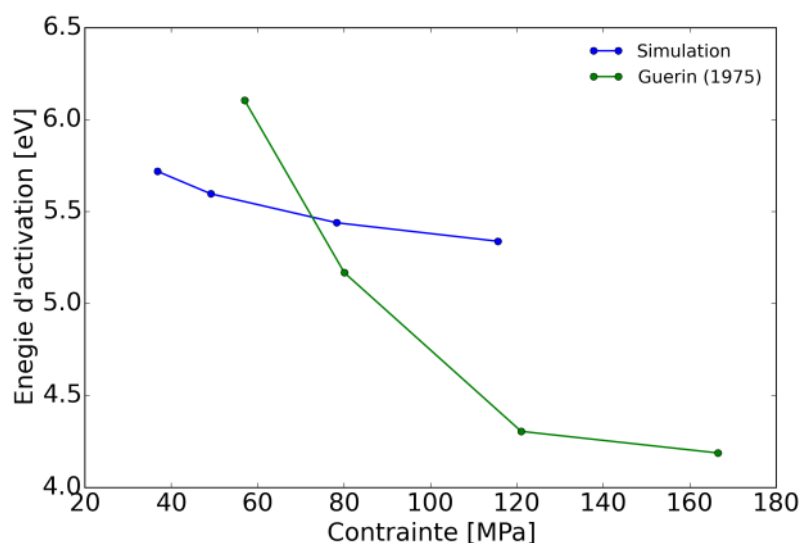


figure 5.23 : Énergie d'activation apparente en fonction de la contrainte - Comparaison simulation-expérience avec un modèle ne considérant pas les GNDs et avec les modes $\{100\}$ et $\{110\}$.

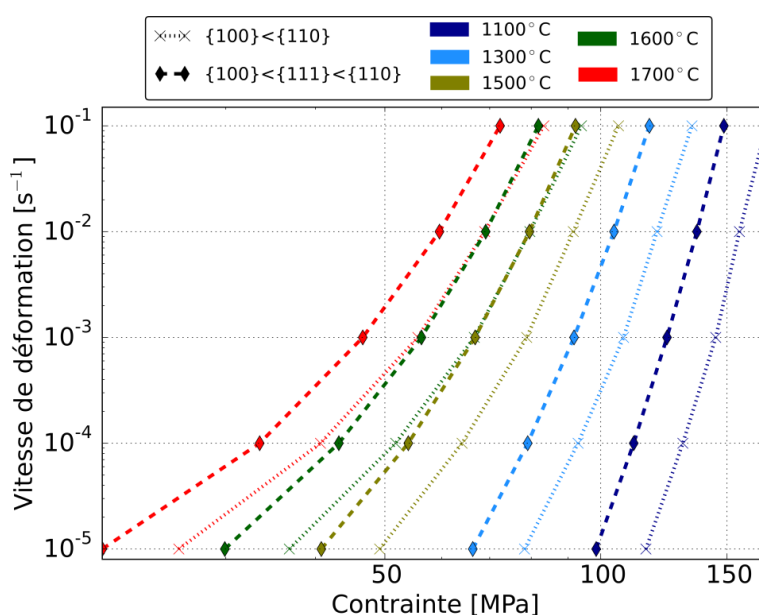


figure 5.24 : Vitesse de déformation en fonction de la contrainte pour différentes température – comparaison du modèle avec deux modes glissement ($\{100\}$ < $\{110\}$) et avec 3 modes glissement ($\{100\}$ < $\{111\}$ < $\{110\}$) et sans GNDs.

5.3.3.2. Sensibilité aux systèmes de glissement

Nous avons choisis dans cette section d'étudier le comportement du polycristal lorsque l'on intègre les systèmes $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{111\}$. Lors des simulations sur monocristaux, la contrainte de compression était généralement plus faible lorsque le

mode $\{111\}$ avait un seuil d'activation intermédiaire entre les deux autres modes (voir Annexe C). Ce constat est confirmé sur la contrainte moyenne du polycristal qui est généralement plus faible avec le mode $\{111\}$ comme le montre la figure 5.24. En revanche, les exposants ont très peu changé (voir figure 5.25). Pour l'énergie d'activation (figure 5.26), les valeurs obtenues avec le mode $\{111\}$ sont légèrement inférieures et la variation en fonction de la contrainte est comparable. Il apparaît donc qu'utiliser le troisième mode affecte surtout la contrainte et très peu les exposants de contrainte et les énergies d'activation.

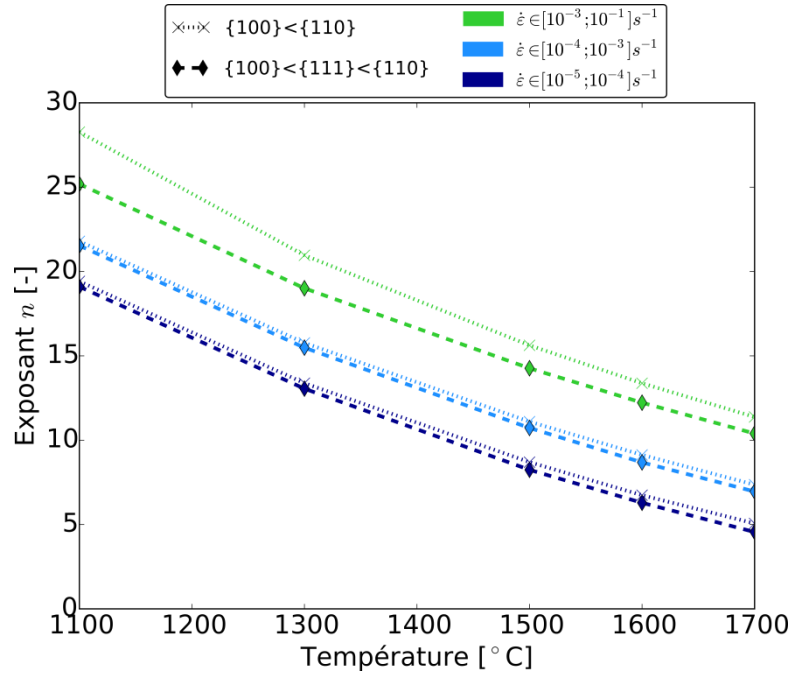


figure 5.25 : Exposant de contrainte n en fonction de la température – comparaison du modèle avec deux modes glissement ($\{100\}<\{110\}$) et avec 3 modes glissement ($\{100\}<\{111\}<\{110\}$) et sans GNDs.

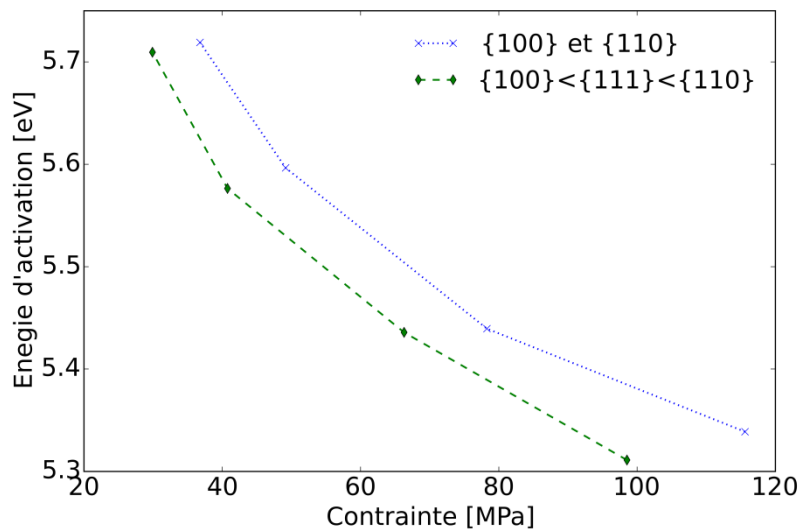
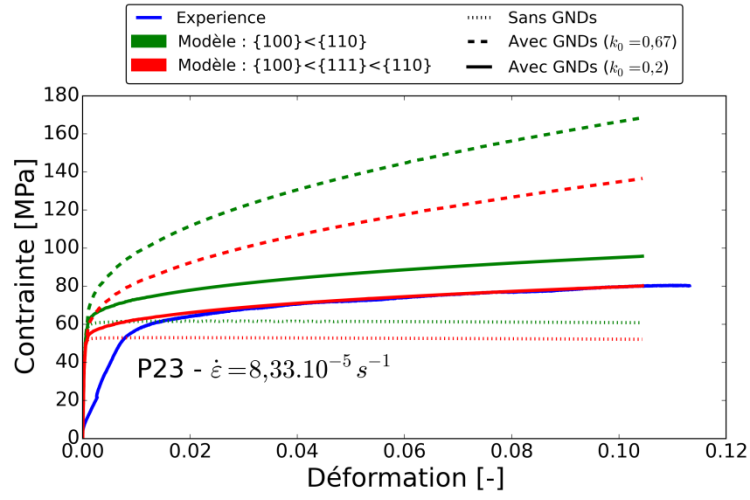
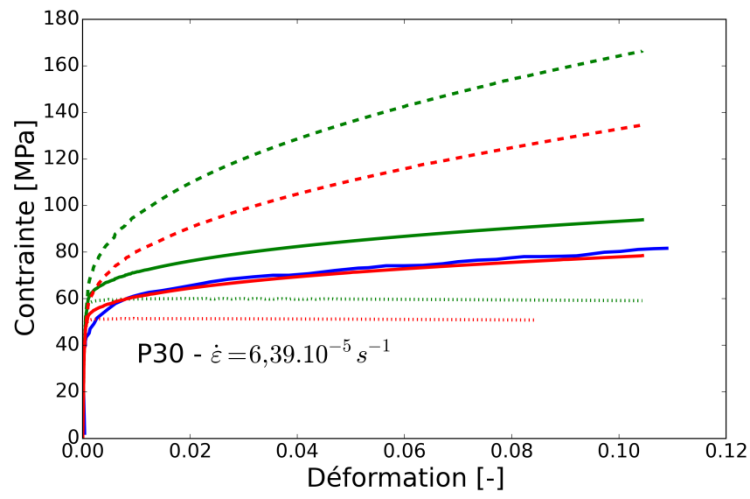


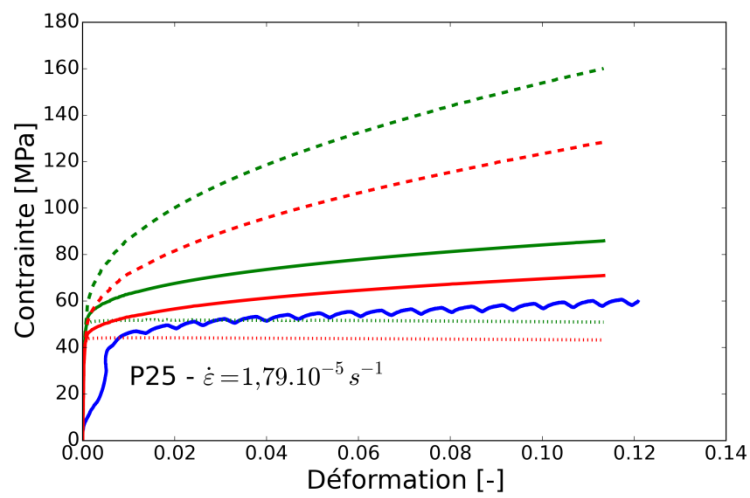
figure 5.26 : Énergie d'activation en fonction de la contrainte – comparaison du modèle avec deux modes glissement ($\{100\}<\{110\}$) et avec 3 modes glissement ($\{100\}<\{111\}<\{110\}$) et sans GNDs.



(a) P23



(b) P30



(c) P25

figure 5.27 : Courbes de contrainte-déformation – Comparaison des essais expérimentaux à 1500°C et $d = 12 \mu\text{m}$ de [Ben Saada \(2017\)](#) décrits en section 5.2.7 avec les résultats de simulation.

5.3.4. Validation du calcul des GNDs

Dans cette partie, nous comparons les résultats de simulation avec les résultats expérimentaux afin de valider le calcul de densité de GNDs. La comparaison se fait dans un premier temps avec les données de [Ben Saada \(2017\)](#) pour lesquels nous avons les courbes de contrainte en fonction de la déformation ainsi que les données d'orientation de chaque pixel issues de l'EBSd pour trois essais décrits dans le tableau 5.2. La figure 5.27 donne les résultats de contrainte en fonction de la déformation.

Dans le cas où les GNDs, ne sont pas considérées dans le modèle, la contrainte d'écoulement est plus faible que l'expérience et ne prédit aucun écrouissage. Lorsque l'on introduit la densité de GNDs et avec un coefficient $k_0 = 0,67$ dans la loi de durcissement décrite en section 5.2.4.2, l'écrouissage est très élevé avec les deux modèles. Après une étude de sensibilité au coefficient k_0 , la valeur de 0,2 permet de donner un écrouissage et une contrainte d'écoulement très comparable avec les données expérimentales pour le modèle considérant les trois modes de glissement. Les résultats avec le modèle considérant deux modes de glissement sont quasiment identiques mais avec des densités de GNDs plus élevées (voir sur la figure 5.28), ce qui induit des contraintes plus fortes.

Pour la pastille P25 (voir figure 5.27(c)) la contrainte et l'écrouissage sont plus faibles expérimentalement que ce qui est prédit en simulation avec $k_0 = 0,2$. La vitesse de sollicitation étant très faible pour cette pastille, il est probable que les mécanismes viscoplastiques soient différents. En effet, [Guerin \(1975\)](#) émet l'hypothèse que le glissement des dislocations assisté par la montée apparaisse plus favorable au-dessus de

1400°C et pour des vitesses en dessous de 10^{-4} s^{-1} . Cela pourrait expliquer la différence observée pour cette pastille car l'implication de la diffusion rend la déformation viscoplastique locale plus isotrope ce qui engendre moins de courbure du réseau et donc moins de GNDs, et bien sûr, moins d'écrouissage.

Notons que sur ces essais les pentes élastiques ne sont pas toujours bien reproduites et ne sont d'ailleurs pas les mêmes entre chaque essai. Cela vient probablement d'un artéfact expérimental.

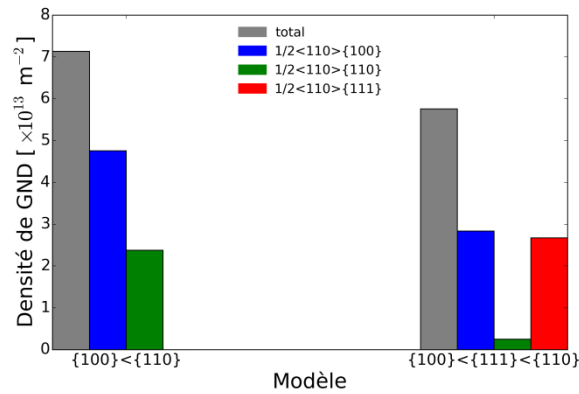
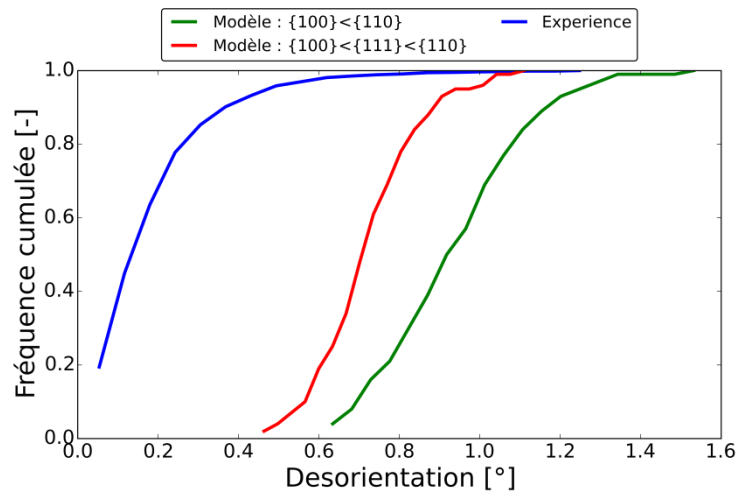


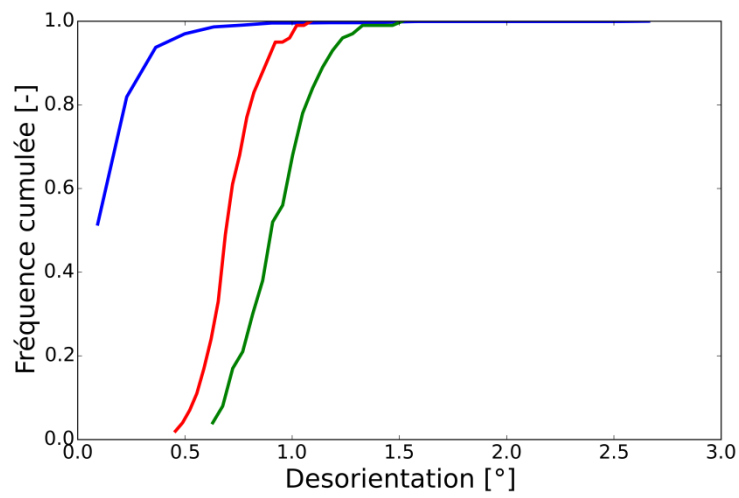
figure 5.28 : Répartition de la densité de GNDs dans les trois modes glissement et sur les deux modèles choisis dans la pastille P23 avec $k_0 = 0,2$ (résultats de contrainte en figure 5.27(a))

Comme deuxième étape de la validation des densités de GNDs, nous comparons le comportement intra-granulaire entre la simulation et l'expérience. Nous avons tracé, sur la figure 5.29, la répartition statistique de la désorientation moyenne de chaque grain pour une distance caractéristique comprise entre 1 et 2 μm . Il apparaît que, quelle que soit la pastille étudiée, la courbure du réseau est plus élevée pour la simulation que pour l'expérience. Or, une forte courbure implique une forte densité de GNDs. On peut donc conclure que la densité de GNDs est surestimée dans la simulation. Néanmoins, le modèle avec trois modes de glissement engendre moins de courbure et moins de GNDs dû à une viscoplasticité plus isotrope avec ce modèle engendrant moins d'hétérogénéités de déformation et permet une meilleure estimation des contraintes que le modèle avec deux modes. Nous ne présentons par la suite que les résultats avec ce modèle.

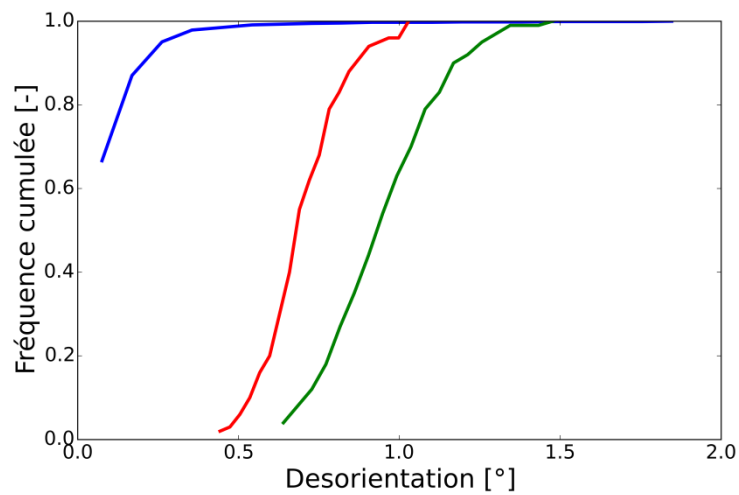
La figure 5.30 affiche les résultats de simulation comparés aux données de [Salvo \(2014\)](#) pour les vitesses de 10^{-4} et 10^{-3} s^{-1} . Pour des températures et des vitesses proches de celles de Ben Saada, la contrainte et l'écrouissage sont en bon accord. En revanche, pour les autres valeurs de vitesse et de température, l'écrouissage ne prédit pas tout à fait le même profil. De manière générale, expérimentalement la tendance de l'écrouissage est décroissante lorsque la température augmente alors que la tendance varie peu en simulation. Ceci est visible à l'aide des pentes en pointillées calculées sur les valeurs entre 2% et 5% de déformations. La pente est quasi-constante dans le cas de la simulation alors qu'elle est décroissante avec l'augmentation de la température dans l'expérience. Somme toute, les résultats sont globalement en bon accord avec les données de Salvo et spécifiquement pour des températures inférieures ou égales à 1500°C . Néanmoins, il semblerait qu'il y ait également une légère différence de sensibilité de la contrainte à la vitesse. Typiquement, pour une variation de vitesse donnée, la simulation voit de plus grandes variations de contrainte que l'expérience.



(a) P23



(b) P30



(c) P25

figure 5.29 : Répartition statistique de la désorientation moyenne par grain pour une distance entre pixels comprise entre 1 et 2 μm – Comparaison des essais expérimentaux de [Ben Saada \(2017\)](#) décrits en section 5.2.7 avec les résultats de simulation.

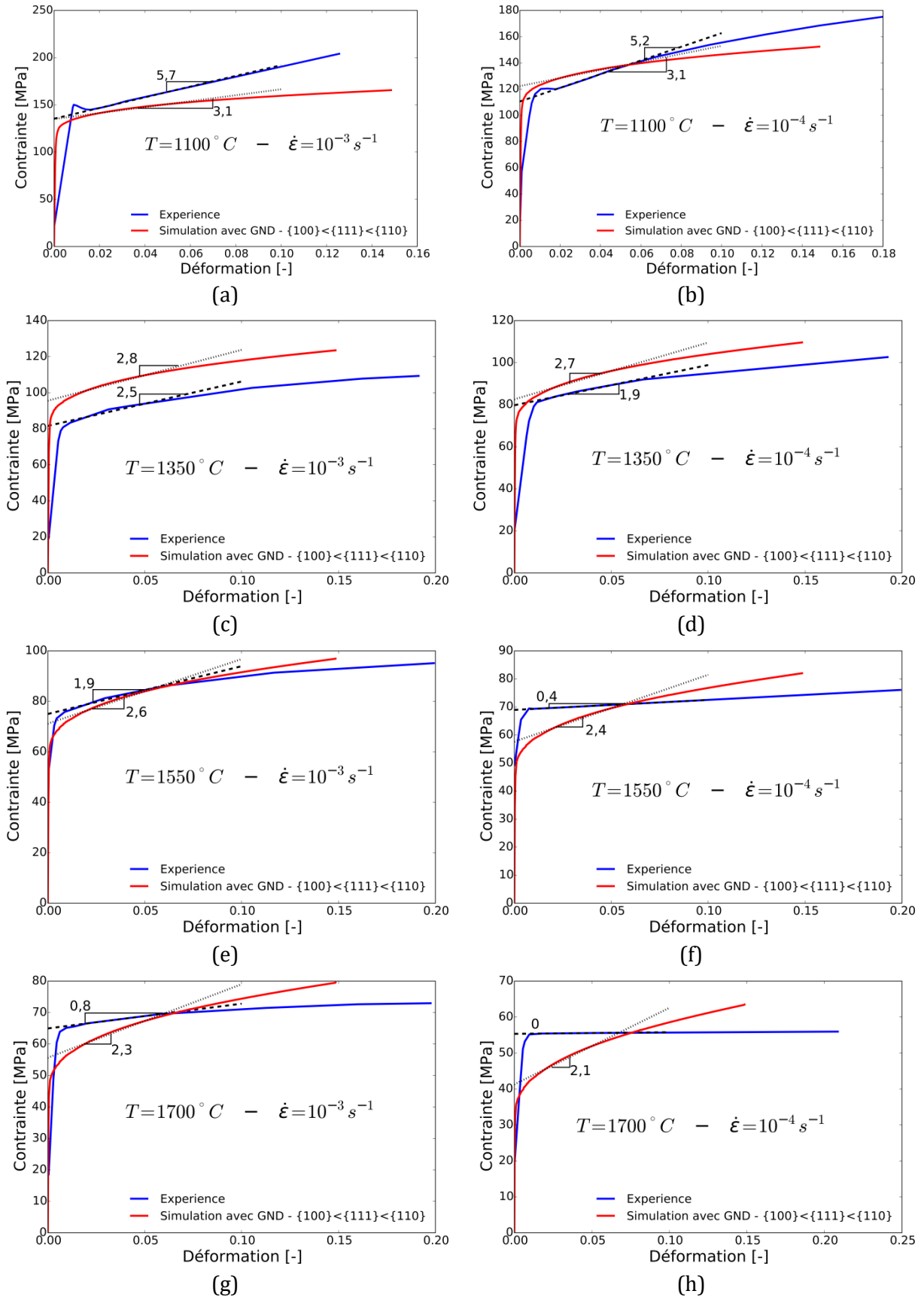


figure 5.30 : Courbes de contrainte-déformation – Comparaison des essais expérimentaux de Salvo (2014) décrits en section 5.2.7 avec les résultats de simulation. Les tirets et point-tillés représentent les pentes expérimentales et simulées entre 2 et 5 % de déformation.

Le précédent constat, nous amène à comparer les dépendances de la vitesse de déformation à la contrainte et à la température, à la fois pour s'assurer que cela reste comparable mais également pour identifier quel est l'effet de l'intégration des GNDs sur ces dépendances. Sur la figure 5.31, nous pouvons observer que la dépendance de la vitesse de déformation à la contrainte est globalement plus élevée lorsque les GNDs sont intégrées dans le modèle, bien que la différence ne soit pas très forte. Concernant l'énergie d'activation en figure 5.32, les contraintes étant plus élevées lorsque l'on considère les GNDs, la sensibilité à la température est légèrement plus forte.

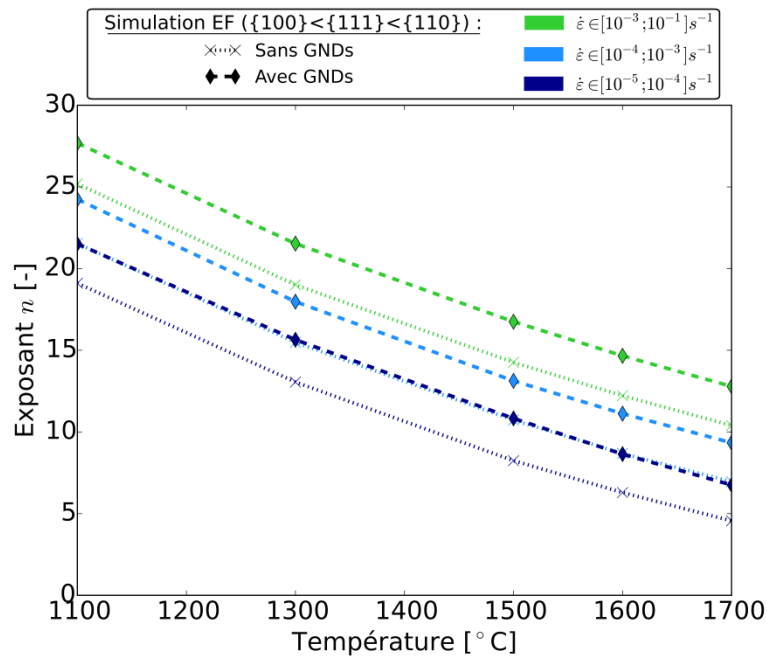


figure 5.31 : Exposant de contrainte n en fonction de la température – Comparaison avec et sans GNDs considérant un modèle avec les 3 modes glissement ($\{100\}<\{111\}<\{110\}$, $k_0 = 0,2$).

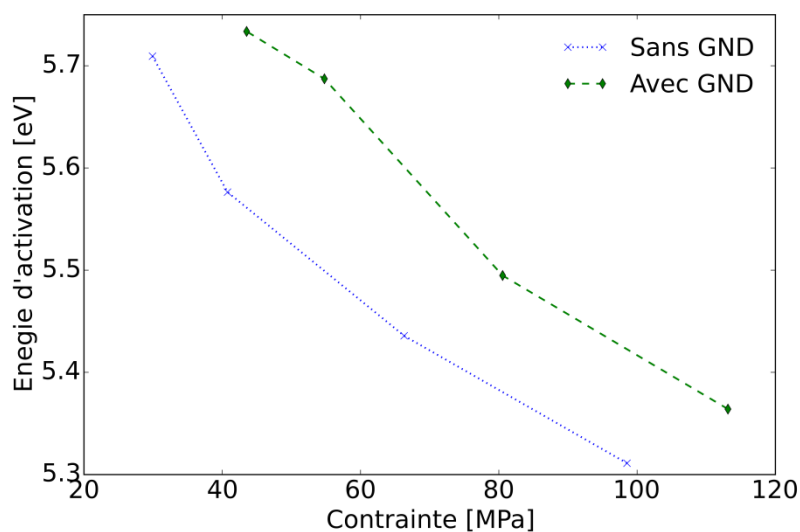


figure 5.32 : Énergie d'activation en fonction de la contrainte – Comparaison avec et sans GNDs considérant un modèle avec les 3 modes glissement ($\{100\}<\{111\}<\{110\}$, $k_0 = 0,2$).

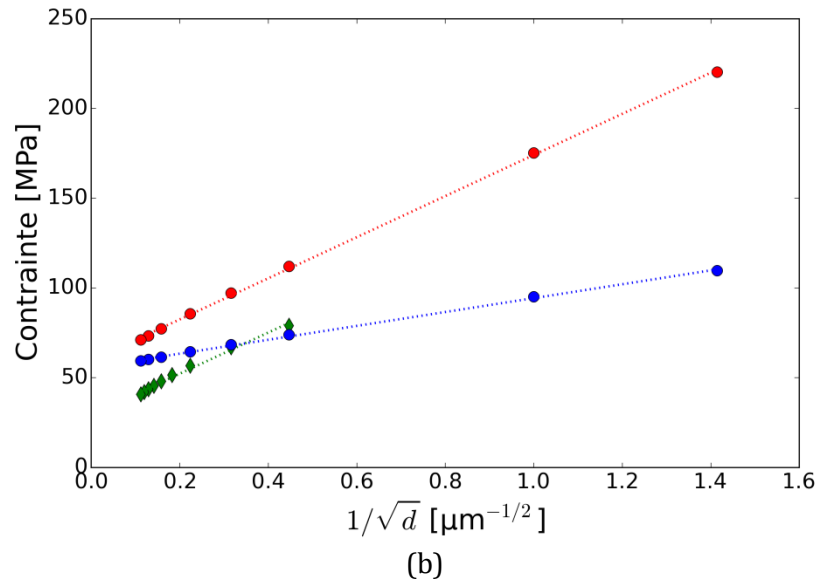
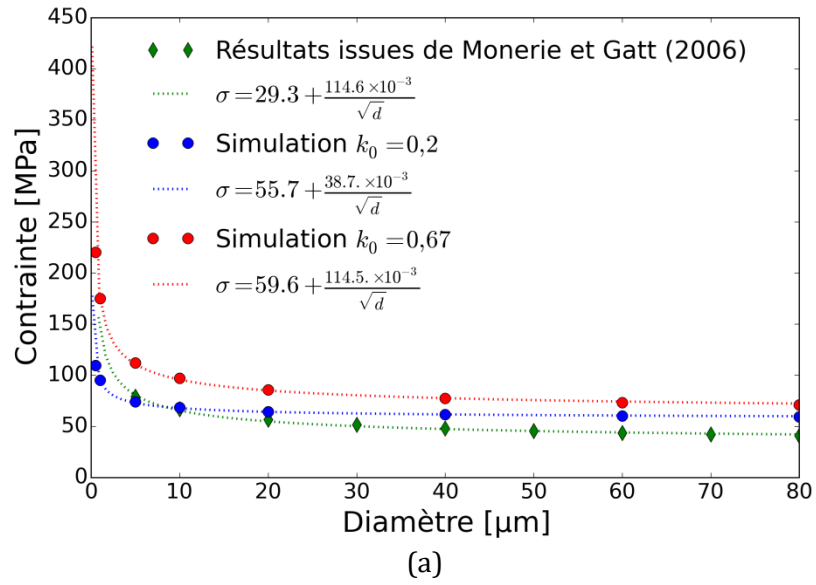


figure 5.33 : Courbes de contrainte à 2% de déformation en fonction de la taille de grain – Comparaison des résultats de simulation avec les résultats issus du modèle [Monerie et Gatt \(2006\)](#).

À titre de dernière comparaison, nous avons tracé en figure 5.33, la contrainte en fonction de la taille de grain pour une température de 1500 °C et une vitesse de 10^{-4} s⁻¹. Il peut être observé que la dépendance de la contrainte à la taille de grain de la simulation suit une loi Hall-Petch [[Hall \(1951\)](#), [Petch \(1953\)](#)] donné par l'équation (5.14) dont les paramètres sont donnés dans la figure 5.33.

Les données expérimentales en fonction de la taille de grain sont issues d'une loi empirique proposée dans la référence [[Monerie et Gatt \(2006\)](#)]. Cette loi macroscopique a été calibrée au mieux pour ajuster la dépendance à la taille de grain, par conséquent, nous la considérons représentative de l'expérience. La comparaison entre la simulation avec $k_0 = 0.2$ et la loi empirique sur la figure 5.33 permet de conclure que la contrainte pour une taille de grain « infinie » (donc sans écrouissage dû au JdG), caractérisée par le

σ_0 de la loi Hall-Petch, est plus élevée pour la simulation. En revanche, la dépendance de la contrainte à la taille de grain, caractérisée par la valeur de k de la loi Hall-Petch, est plus forte pour l'expérience.

Nous avons tracé en rouge sur la figure 5.33, la dépendance à la taille de grain pour un modèle d'écrouissage comportant un coefficient $k_0 = 0,67$. Il apparaît que la dépendance à la taille de grain est comparable à l'expérience figure 5.33(b), cependant la contrainte est toujours surestimée. De plus, il apparaît que, quel que soit la valeur de k_0 choisie, la contrainte à taille de grain infinie σ_0 est toujours surestimée. Nous discuterons ces derniers points dans la section suivante.

5.4. Discussions

5.4.1. Sensibilité de la vitesse de déformation à la contrainte et à la température

Concernant la sensibilité de la vitesse de déformation à la contrainte dans la simulation nous remarquons quatre résultats notables :

- (i) Plus la température est élevée, moins la vitesse de déformation est sensible à la contrainte ce qui est conforme à ce qu'on observe expérimentalement,
- (ii) Plus la vitesse de déformation est élevée, plus elle est sensible à la contrainte comme pour l'expérience,
- (iii) Il apparaît que la sensibilité de la vitesse de déformation à la contrainte n'est pas beaucoup modifiée en fonction de la prise en compte ou non du mode $\{111\}$ dans le modèle,
- (iv) En intégrant l'écrouissage lié aux GNDs dans le modèle la sensibilité à la contrainte est plus forte et légèrement surévaluée par rapport à l'expérience.

Nous avons cité dans le chapitre 2 que lorsque l'exposant de contrainte est croissant avec la contrainte dans un graphe *log-log*, la dépendance de la vitesse à la contrainte n'est plus caractéristique d'une loi puissance mais d'une loi de type exponentielle. Ceci justifie la forme en sinus hyperbolique choisie par [Soulacroix \(2014\)](#) et [Salvo \(2014\)](#).

Concernant la sensibilité de la vitesse de déformation à la température entre les différents modèles utilisés, la dépendance est généralement décroissante avec la contrainte. Ceci peut s'expliquer dans le domaine du glissement des dislocations thermiquement activé par la variation de la barrière d'énergie en fonction de la contrainte comme considéré dans l'équation (2.9) page 27. En effet, dans cette équation, lorsque la contrainte augmente, l'énergie nécessaire pour franchir la barrière de Peierls diminue donnant une sensibilité à la température décroissante.

De manière générale, l'intégration des GNDs engendre des contraintes d'écoulement plus élevées ce qui a pour conséquence de faire augmenter les exposants apparents de contrainte et les énergies d'activations.

5.4.2. Prédiction de la contrainte en fonction de la taille de grain

Les résultats de l'évolution de la contrainte avec la taille de grain montrent que le coefficient $k_0 = 0,67$ est suffisant pour compenser l'approximation du modèle ne représentant pas la localisation des GNDs dans les S-JdG (voir explication section 5.2.4.2) et ainsi avoir une bonne description de l'effet Hall-Petch des polycristaux d' UO_2 . Cependant, il apparaît que les contraintes sont trop élevées par rapport aux valeurs expérimentales et même pour des grandes tailles de grain où l'effet Hall-Petch n'a plus beaucoup d'effet. De plus la courbure du réseau est toujours surestimée engendrant des densités de GNDs trop élevées. Nous discuterons ces deux points dans la section suivante.

Toutefois, en utilisant un coefficient $k_0 = 0,2$ la contrainte et l'écrouissage sont bien estimés pour des tailles de grain de l'ordre de $10\ \mu\text{m}$ montrant que le modèle actuel peut être utilisé pour des pastilles dont la taille de grain est proche de cette valeur.

5.4.3. Implication d'autres mécanismes

Dans ce chapitre il apparaît que le modèle développé est efficace pour prédire le comportement polycristallin de l' UO_2 . Néanmoins, certains points restent à éclaircir, à savoir la densité de GNDs trop élevées, la variation de l'énergie d'activation apparente plus faible en simulation et les écarts de contraintes sur l'effet de taille de grain. Effectivement, sur la figure 5.33 avec un $k_0 = 0,67$, nous pouvons observer qu'il est possible d'avoir la bonne dépendance à la taille de grain mais avec des contraintes systématiquement surestimées. La première hypothèse serait de dire que le modèle calibré sur monocristaux n'est pas parfaitement adapté pour la simulation sur polycristaux en imaginant qu'il faudrait plus de cisaillement pour avoir des contraintes plus faibles. Cependant, cela ne changerait pas les hétérogénéités de déformation dans les grains et donc la description des GNDs. Avec un $k_0 = 0,67$, l'évolution du durcissement au cours de la déformation resterait incohérente avec l'expérience comme le montre la figure 5.27.

Par conséquent, il est possible que d'autres mécanismes viscoplastiques interviennent dans la déformation de l' UO_2 en plus du glissement des dislocations. Ces mécanismes peuvent être dépendants ou indépendants du glissement des dislocations et très certainement thermiquement activés. Les pistes potentielles sont :

- (i) la diffusion de lacunes au JdG,
- (ii) la diffusion de lacunes dans les grains,
- (iii) le glissement assisté par la montée de dislocations,

(iv) le glissement dévié.

Notons que le principal facteur pouvant atténuer les fortes densités de GNDs et du même coup les contraintes est la diminution du gradient de cisaillement (vraisemblablement lié à une viscoplasticité cristalline plus isotrope). En effet, plus il y a d'hétérogénéité des déformations, plus la densité de GNDs est forte.

Les mécanismes de (i) à (iv) permettent tous de faire diminuer les densités de GNDs. Toutefois, Les mécanismes (iii) et (iv) sont régulièrement évoqués dans la littérature (et le mécanisme (iv) évoqué dans les chapitres 3 et 4) et seraient pertinents pour améliorer la description de la restauration dynamique permettant de former des S-JdG [Montheillet (2009)] qui ne sont pas représentés dans notre modèle.

Les effets de diffusions lacunaires (i) et (ii) sont très certainement négligeables sur monocristaux du fait des effets de taille qui engendrent une viscoplasticité extrêmement lente. En effet, nous avons cité en section 2.3 page 23 que le mécanisme Nabarro-Herring donne une vitesse de déformation proportionnelle à l'inverse de la taille de grain au carré : $\dot{\epsilon} \propto \frac{1}{d^2}$, et au cube pour le mécanisme de Coble : $\dot{\epsilon} \propto \frac{1}{d^3}$. En effet, ces mécanismes deviennent négligeables face aux mouvements de dislocations si on considère la taille du monocristal, supérieure au millimètre, comparée à la taille micrométrique des grains du polycristal. De plus, il est possible que ces mécanismes ne soient pas présents dans les gammes de température-contrainte testées expérimentalement sur les monocristaux utilisés pour ajuster notre modèle. En effet, Guerin (1975) émet l'hypothèse de la présence de la diffusion de lacunes peut apparaître pour des températures de 1500°C avec des vitesses inférieures à 10^{-4} s^{-1} . De plus, Lefebvre (1976) ne met pas en évidence d'effet de diffusion sur le glissement dislocation dans les monocristaux en dessous de 1400°C. La contribution du fluage par diffusion de lacunes ne peut donc pas être identifiée directement sur le modèle monocristallin et reste une explication possible des différences observées lors de la comparaison avec résultats expérimentaux sur polycristal.

D'autre part il est tout à fait légitime de s'interroger sur les limites de l'approche utilisée pour prendre en compte les GNDs. Il existe aujourd'hui de nouvelles techniques plus réalistes qui permettent de représenter l'évolution de la densité des dislocations au sein des grains que l'on appelle Dynamique des Dislocations Continues. Cette technique permettrait potentiellement de décrire la formation de S-JdG. Cependant l'approche utilisée dans ce chapitre semble suffisamment représentative pour avoir des résultats en très bon accord avec l'expérience.

5.5. Conclusions

Dans ce chapitre nous avons utilisé le modèle de comportement viscoplastique qui a été calibré sur monocristaux dans le chapitre 3 pour la simulation EF du polycristal d'UO₂. Afin de prendre en compte la taille de grain, la loi d'écrouissage de la forêt a été intégrée au modèle pour traduire les interactions entre dislocations mobiles et GNDs. Une correction de cette loi a été proposée pour compenser les limites du calcul EF qui ne permet pas de représenter la localisation des GNDs dans les S-JdG. Avec ce modèle adapté, nous avons comparé les données de contraintes en fonction de la déformation pour plusieurs températures et vitesses de déformation afin de valider la modélisation. De plus, une validation de la prédiction des hétérogénéités des déformations a été réalisée à l'aide de la comparaison calcul-mesure de la courbure du réseau cristallin accessible expérimentalement par mesures EBSD.

Finalement, la validation mène à considérer que le modèle est suffisamment prédictif pour comprendre et simuler le comportement viscoplastique des pastilles combustibles. On note notamment que pour la première fois pour l'UO₂, le modèle permet la description du durcissement et de l'effet de taille de grain à partir de l'évolution de la microstructure ainsi qu'une première quantification des hétérogénéités de déformation permettant d'avoir des outils pour valider et améliorer la prédiction à la fois à l'état macroscopique mais également à l'état intra-granulaire.

Les principaux résultats montrent une bonne prédiction des contraintes autour de 1500°C pour des vitesses de déformation entre 10^{-5} et 10^{-3} s^{-1} avec un écrouissage au cours de la déformation cohérent avec l'expérience. Les études de sensibilité de la vitesse de déformation en contrainte et en température montrent également un bon accord avec l'expérience. Toutefois, lorsque la contrainte est cohérente avec l'expérience pour des grains de l'ordre de 10 μm , la prédiction n'est pas bonne pour les autres tailles de grain. La modification du modèle de durcissement peut permettre d'avoir une prédiction plus cohérente avec la sensibilité de la taille de grain de l'expérience mais avec des contraintes systématiquement surestimées. De même, la courbure du réseau cristallin est largement surestimée en EF. Ces deux derniers points mènent à penser que le glissement des dislocations pour des températures de l'ordre de 1500°C et des vitesses inférieures à 10^{-4} s^{-1} est lié à un mécanisme de diffusion de lacunes qui aurait pour conséquence de faire diminuer les contraintes et du même coup la courbure du réseau.

6. Conclusion générale

Lors du fonctionnement des REP, il y a des risques de rupture de la première barrière de confinement lié à un phénomène d'interaction entre la pastille combustible et la gaine. La sollicitation induite par ce phénomène dépend du comportement mécanique de la pastille combustible, à haute température la déformation viscoplastique permet d'atténuer les contraintes d'interaction entre la pastille et la gaine. De plus, l'irradiation engendre des modifications physico-chimiques du combustible couplées au comportement viscoplastique via l'état local des contraintes. De ce fait, afin d'améliorer les connaissances du comportement thermo-viscoplastique de la pastille, cette thèse visait à développer la modélisation et aussi les outils de simulation permettant de décrire la déformation du combustible UO_2 induite par le glissement des dislocations en prenant en compte l'échelle de la microstructure polycristalline. Ces travaux qui portent exclusivement sur le combustible vierge permettent de compléter la compréhension du comportement à petite échelle et de ce fait de préparer les futures modélisations prenant en compte les effets de l'irradiation.

Sur les dislocations dans l' UO_2 , il est clairement établi dans la littérature à partir d'essais sur monocristaux que 3 modes de glissement thermiquement activés sont impliqués dans la déformation du combustible. Néanmoins, la contribution de ces modes de glissement à la déformation viscoplastique totale et celle des interactions entre dislocations sont beaucoup moins documentées. Ce sont donc les deux aspects que nous avons principalement étudiés. Dans les deux premières parties de cette thèse pour valider un comportement du grain ensuite utilisé pour étudier la réponse du polycristal.

La microstructure polycristalline joue un rôle important sur le comportement viscoplastique du fait des joints de grain qui engendrent une incompatibilité de déformation se traduisant par des hétérogénéités de contrainte et de déformation. Afin de contribuer à la compréhension de ces effets de la microstructure nous avons proposé, en troisième partie, des améliorations et une validation de l'approche à champs complets utilisée au CEA pour simuler le comportement viscoplastique d'un élément de volume polycristallin afin de mettre au point les lois de comportement de la pastille.

6.1. Méthode et résultats

6.1.1. Modèle de plasticité cristalline

Après une étude détaillée de la littérature sur monocristaux, nous avons amélioré la loi de comportement cristalline mise en place dans les travaux antérieurs. Le modèle utilisé est basé sur la loi d'Orowan avec une loi de glissement des dislocations thermiquement activé. Les trois modes de glissement identifiés dans l' UO_2 sont pris en

compte avec 24 systèmes de glissement. Pour améliorer le calcul de la rotation du cristal induite par le glissement des dislocations une implémentation de la loi de comportement en transformations finies a été réalisée.

Le principal apport de la thèse sur cette partie concerne l'identification des paramètres du modèle de plasticité cristalline de l' UO_2 . Pour cela une étude bibliographique complète des essais sur monocristaux a été proposée avec une étape d'identification sur des configurations de glissement simple. Nos résultats ont permis de confirmer la différence de seuil d'activation entre les modes $\{100\}$ « mou » et $\{110\}$ « dur », et d'établir la dépendance en température dans la loi de glissement thermiquement activée.

6.1.2. Monocristaux

Sans écrouissage par interactions des dislocations

Les essais de compression sur monocristaux ont ensuite été simulés par EF pour analyser des configurations de glissements multiples impliquant les trois modes de l' UO_2 . Nos travaux ont permis un début de validation avec une interprétation détaillée de l'anisotropie viscoplastique et de la rotation cristalline en fonction de l'orientation du cristal par rapport à l'axe de compression. Pour cela nous avons fait des comparaisons calcul-mesure de l'évolution de la contrainte au cours de la déformation, de la rotation et de l'activation des systèmes. Lorsque l'on considère dans le modèle uniquement les modes $\{100\}$ et $\{110\}$, qui peuvent être observés indépendamment expérimentalement à l'aide de traces de glissement en surfaces, on obtient les résultats suivants :

- l'anisotropie viscoplastique est souvent bien prédite avec une évolution cohérente de la contrainte,
- le modèle permet de prédire le durcissement lié à la rotation du réseau cristallin au cours de la déformation,
- les rotations de réseau et l'activation des différents systèmes sont également souvent en bon accord avec l'expérience.

Notons que ces résultats sont limités aux orientations pour lesquelles les systèmes actifs ont été identifiés expérimentalement sans ambiguïté.

Par ailleurs, pour certaines orientations cristallines où les observations de glissement font intervenir les systèmes $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{111\}$, les résultats ne sont plus aussi prédictifs. De plus, les systèmes $\{111\}$ n'ayant jamais été observés seuls sur les traces de glissement il n'est pas possible d'identifier leur CRSS. Nous avons donc réalisé une étude paramétrique sur le seuil d'activation des systèmes du mode $\{111\}$. Cela nous a permis de conclure que l'implication de ce mode améliore l'accord avec les contraintes et les rotations mesurées expérimentalement pour certaines orientations. Il est important de noter que lors de l'activation simultanée de plusieurs systèmes les traces de glissement ne permettent pas une identification précise des systèmes actifs et que les rotations

apportent alors une information complémentaire très utile. Finalement, bien que nous ayons mis en évidence l'importance des systèmes $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{111\}$, il n'a pas été possible d'établir un jeu de paramètres unique expliquant les résultats expérimentaux pour toutes les orientations. Ceci nous a conduit à conclure que considérer uniquement la loi de Schmid dans le modèle n'était pas suffisant pour prédire l'activation des systèmes (en particulier le mode $\{111\}$) en fonction de l'orientation cristalline et que d'autres mécanismes sont en jeu. Notons tout de même qu'à ce stade, le modèle a été jugé suffisamment prédictif pour être utilisé dans la simulation du comportement du polycristal.

Avec écrouissage par interactions des dislocations

Parmi les mécanismes permettant de décrire l'anisotropie viscoplastique des monocristaux, les mécanismes d'interaction entre dislocations sont une piste que nous avons souhaitée étudier car il apparaît dans la littérature qu'ils peuvent être responsables de la modification de l'activation des systèmes suivant l'orientation cristalline considérée dans d'autres matériaux. De plus, ces mécanismes d'interaction semblaient nécessaires pour la simulation des polycristaux où les densités de dislocations peuvent être élevées du fait du confinement des dislocations dans les grains. Dans le modèle de plasticité cristalline, ces interactions sont décrites à l'aide de la loi de la forêt généralisée à tous les systèmes de glissement permettant de décrire la force des interactions entre systèmes de glissement. L'utilisation de cette loi passe par la connaissance des coefficients de la matrice d'interaction. Pour identifier les coefficients d'interaction de l' UO_2 , nous avons effectué des simulations de la Dynamique des Dislocations.

D'un point de vue méthode, cette étude demandait d'adapter la simulation spécifiquement pour l' UO_2 . Nous avons intégré de nouvelles bases de vecteur dans le code de DD pour prendre en compte tous les modes de glissement de l' UO_2 , nous avons optimisé les volumes de simulation afin d'éviter tout artéfact lors des simulations et nous avons intégré les énergies et tensions de lignes anisotrope et leur approximations isotropes pour chaque type de systèmes et chaque type de jonctions. L'ensemble des jonctions ont été établies pour ce matériau et testées à l'aide de la DD. Cette étude des cartographies de la formation de jonctions, nous a aussi permis de montrer que l'utilisation d'une approximation de type Bacon-Scattergood donne de bons résultats.

Faute de disposer d'assez d'information sur la mobilité anisotrope des dislocations à basse température, ces coefficients de la matrice d'interaction ont été calculés par DD pour le régime athermique. On montre qu'il y a, comme dans les métaux, une forte variation de la force de l'interaction en fonction de la nature des recombinaisons avec de très faibles jonctions de type Hirth tandis que les autres jonctions sont de forces modérées et les annihilations par interactions colinéaire associées à de très forts coefficients.

Ces coefficients ont enfin été intégrés au modèle de plasticité cristalline. Toutefois, il est important de noter que ces coefficients représentent la force maximum de réaction caractéristique du régime athermique. Les résultats expérimentaux disponibles sur monocristaux étant dans un régime thermiquement activé, nous les avons confrontés avec un modèle mélangeant glissement thermiquement activé et prise en compte des interactions entre dislocations de type athermique. Ceci constitue une forte approximation, pas nécessairement juste mais qui permet d'estimer l'effet maximum des interactions. Et en effet, dans notre cas, le modèle prédit un écrouissage trop élevé par rapport à l'expérience. Finalement, même avec un effet majoré des interactions on n'obtient pas de changements importants sur l'activation des systèmes et c'est encore moins sensible en calibrant le modèle pour avoir un écrouissage plus en rapport avec les expériences. Le glissement thermiquement activé est dominant à 1600 K. Ces coefficients sont plus utiles pour des températures plus élevées (dans la plage [1750 K - 2000 K] pour lesquels des données expérimentales sont disponibles pour les polycristaux) où l'activation du glissement des dislocations est athermique (au moins pour le mode {100}). D'autre part, les plus fortes densités de dislocation et les effets de taille de grain sur polycristaux renforce le rôle des interactions et justifie le recours à la modélisation de ces interactions. Mais la validation préalable de ces dernières dans les conditions représentatives utiles (température, densité de dislocations) n'est pas possible avec des données expérimentales actuellement disponibles sur monocristaux.

Enfin, bien que ces interactions ne permettent pas de répondre aux interrogations restantes sur l'interprétation de l'anisotropie viscoplastique, cette étude nous a permis d'écarter la piste des interactions mais aussi d'identifier une piste intéressante qui est l'effet du glissement dévié et qui est régulièrement cité dans la littérature.

6.1.3. Polycristaux

Après avoir développé et validé le modèle sur monocristaux nous l'avons appliqué pour simuler le comportement viscoplastique des polycristaux. Les travaux de thèse ont permis les améliorations nécessaires pour prendre en compte l'effet de taille de grain. Cet effet traduit le fait que les dislocations ne peuvent pas traverser les joints de grain, ce qui conduit à une augmentation de la densité de dislocations stockées et des interactions associées lorsque la taille de grain diminue et donc à un durcissement accru de type Hall-Petch. Pour se faire, il a été nécessaire de proposer et développer une méthode pour calculer ces densités de dislocations dites géométriquement nécessaires dans la simulation EF du polycristal. Une méthode basée sur le gradient de cisaillement dans les grains pour chaque système de glissement a été implémentée dans Cast3M. Cette densité de dislocations stockées a été introduite dans le modèle de la forêt pour calculer le durcissement associé aux interactions entre dislocations et GNDs. Ce type d'approche induit un écrouissage isotrope dans les polycristaux alors qu'une partie cinématique est probablement en cause. Cependant, il est rare d'avoir des chargements

cycliques en rampe de puissance incidentelle où la description de l'écrouissage cinématique intervient.

Les résultats de simulation ont été comparés aux mesures expérimentales de l'évolution de la contrainte au cours de la déformation pour plusieurs températures, vitesses de sollicitation et valeurs de tailles de grain. Afin de contribuer à la validation de notre simulation à l'échelle intra-granulaire une méthodologie permettant la comparaison avec les hétérogénéités des déformations expérimentales au sein des grains a été proposée. Ces hétérogénéités n'étant pas directement mesurables la méthode développée utilise une validation indirecte avec la courbure du réseau dans les grains qui peut être mesurée à l'aide de l'EBSD. Les différences de géométrie des grains entre la simulation 3D et l'EBSD 2D nous ont amenés à proposer un outil statistique pour effectuer la comparaison.

Les résultats de la thèse ont permis des avancées significatives sur la prédiction de:

- l'écrouissage du polycristal,
- l'effet de la taille de grain,
- et la sensibilité de la vitesse de déformation à la température et à la contrainte,

Les résultats de comparaison simulation expérience ont permis d'établir le domaine de validité suivant :

- prédiction cohérente avec l'expérience des courbes contrainte-déformation pour des températures proches de 1500°C et des tailles de grain de l'ordre de 10µm,
- bonne prédiction de la sensibilité de la vitesse de déformation à la contrainte,
- sous-estimation de la sensibilité de la vitesse de déformation et de l'écrouissage à la température,
- pour les autres tailles de grains, le modèle n'est plus cohérent avec l'expérience, mais une modification du modèle permet une prédiction de l'effet de taille de grain avec cependant une surestimation systématique de la contrainte,
- surestimation de la courbure du réseau intragranulaire montrant des densités de GNDs calculées trop fortes.

L'ensemble de ces résultats montre que le modèle est opérationnel pour prédire le comportement de la pastille dans un domaine de température de 1100°C à 1500°C avec des grains de 10 µm qui sont représentatifs du produit industriel. Les limites de la formulation proposée ont été analysées en détail et font ressortir plusieurs pistes d'amélioration pour le modèle à plus haute température. L'analyse fait ressortir notamment les effets liés à des mécanismes de diffusion de lacunes qui ne sont pas encore considérés dans le modèle.

6.2. Perspectives

Finalement, en l'état le modèle proposé restitue globalement bien le comportement polycristallin et peut être ajusté pour être représentatif de l' UO_2 . Toutefois, nous avons identifié dans cette thèse certaines pistes d'amélioration.

Sur le comportement thermo-viscoplastique

Concernant le comportement thermo-viscoplastique du combustible vierge les principaux points à approfondir pour améliorer la simulation du comportement des monocristaux et des polycristaux sont : la loi de glissement thermiquement activée des dislocations et la prise en compte du phénomène de diffusion des défauts lacunaires (sans et avec interaction avec le glissement).

Caractériser les mécanismes de glissement des dislocations à très petite échelle serait très utile pour établir une loi de mobilité à base physique et améliorer ainsi le modèle en plasticité cristalline et les simulations réalisées en DD. Pour caractériser cette mobilité des dislocations, des observations MET in-situ en température seraient très utiles. Cela permettrait peut être également de mieux comprendre l'effet du glissement dévié vers les systèmes $\{111\}$. Cependant il est connu que la technique et que l'obtention de lames minces comportant des dislocations (l' UO_2 en comportant peu) ne sont pas aisés. En parallèle, des simulations atomistiques ont commencé à étudier les mouvements du mode $\{100\}$ et montrent un mouvement thermiquement activé par double-décrochements. Cependant, certains mécanismes restent inexpliqués ne permettant pas la prédiction du comportement monocristallin car l'étude reste à étendre à minima aux autres systèmes de glissement.

Les mécanismes de diffusion de défauts lacunaires en volume ou en surface peuvent être intégrés au modèle de plasticité cristalline de façon simplifiée avec une loi de type macroscopique. Cela permettrait dans une première étape de vérifier si ce phénomène explique les écarts observés lors de la validation des simulations à l'échelle du polycristal. Si cette piste s'avère intéressante on peut envisager une modélisation microscopique en résolvant l'équation de diffusion des défauts lacunaires sur le polycristal (avec des JdG puits ou sources de lacune) et calculer ainsi une déformation non locale à ajouter à la déformation liée au glissement des dislocations.

Concernant l'interaction de la diffusion des défauts lacunaire avec le glissement des dislocations il faudrait vraisemblablement avoir recours à une réflexion plus large pour bien identifier le domaine vitesse de déformation-température visé et les mécanismes d'interaction pouvant potentiellement être impliqués.

Par ailleurs, pour compléter la validation il conviendrait de réaliser de nouveaux essais expérimentaux complémentaires sur pastille avec des mesures systématiques en

EBSD pour une large gamme de températures, vitesses et de tailles de grain. Des essais sur monocristaux seraient également très utiles pour compléter la grille expérimentale en températures, vitesses et orientations cristallines..

Enfin, l'étude de la stoechiométrie reste largement à étudier à la fois sur pastille et monocristaux afin de comprendre l'effet de ce paramètre sur les mécanismes de diffusion de lacunes et de mouvement de dislocations.

Interaction des dislocations avec porosités

Parmi les autres mécanismes qui ne sont pas cités dans cette thèse mais importants pour le comportement du combustible, nous pouvons citer les interactions des dislocations avec les pores intra-granulaires qui semblent être importants pour les mécanismes de formation de sous-joints. En effet, il a été observé que les dislocations pouvaient être épinglées par ces bulles et engendrer un durcissement du matériau. Cela peut également être étudié en DD à condition de pouvoir modéliser des porosités.

Effet des défauts d'irradiation

Finalement, il apparaît que les dislocations peuvent également interagir avec les défauts créés lors de l'irradiation telle que de nouvelles dislocations, des boucles prismatiques et bulles sous-pression. Il convient donc d'étudier ces interactions à l'aide de simulations atomistiques et de DD pour pouvoir évaluer les effets de durcissement associés suivant les principes proposés dans cette thèse pour la modélisation de l'écrouissage et la prise en compte de l'effet de taille de grain.

Annexe A

Fichier MFront pour un modèle comportant les trois modes de glissement où l'activation du mode 3 est intermédiaire aux deux autres modes (pas d'interaction entre dislocations ni GNDs)

```
@Parser ImplicitFiniteStrain;
@Behaviour MonoCristal_UO2;
@Author Luc Porteleite;
@Description{
  "Modèle de plasticité cristalline UO2"
  "Transformation finies"
}
@Theta 1.;
@Epsilon 1.e-10 ;
@IterMax 100 ;

@UMATUseTimeSubStepping true;
@UMATMaximumSubStepping 50;

@ModellingHypothesis Tridimensional;
@OrthotropicBehaviour;
@RequireStiffnessTensor;
@Algorithm NewtonRaphson_NumericalJacobian;

/** Fichier avec les systèmes et leurs tenseurs de Schmid */
@Includes {
#include "FluorineUO2SlidingSystems.hxx"
}
@Members {
// Systèmes de glissement
typedef FluorineUO2SlidingSystems<real> SlidingSystems;
// Nombre de système de glissement
static const unsigned short Nss = SlidingSystems::Nss;
}

/** déclaration des variables d'état */
@IntegrationVariable StrainStensor eel ;
@StateVariable real gam[24] ;
@AuxiliaryStateVariable Tensor Fe ;
@AuxiliaryStateVariable Tensor Re ;

/** Déclaration des variables locales */
@LocalVariable Stensor Ue ;
@LocalVariable Tensor Fe_tr ;
@LocalVariable Tensor dF ;
@LocalVariable Tensor Fe0 ;
@LocalVariable StressStensor S ;
@LocalVariable DeformationGradientTensor inv_dFp ;
@LocalVariable real del_gam[24] ;
@LocalVariable real mu ;
@LocalVariable real b ;
@LocalVariable real tau0 ;
@LocalVariable real gp0 ;
@LocalVariable tfel::math::tmatrix<24,24,real> a ;
@LocalVariable real rho0 ;
// Paramètres du mode {100}
@LocalVariable real DH0_1 ;
@LocalVariable real tau0_1 ;
@LocalVariable real gp0_1 ;
@LocalVariable real rhom_1 ;
// Paramètres du mode {110}
@LocalVariable real DH0_2 ;
@LocalVariable real tau0_2 ;
@LocalVariable real gp0_2 ;
@LocalVariable real rhom_2 ;
// Paramètres du mode {111}
@LocalVariable real DH0_3 ;
@LocalVariable real tau0_3 ;
@LocalVariable real gp0_3 ;
@LocalVariable real rhom_3 ;
/** Initialisation des variables locales */
@InitLocalVars {
// Increment du gradient de la transformation
// F0 et F1 sont connus via Cast3M
dF = F1*invert(F0);
// Sauvegarde de la partie élastique du gradient de la
// transformation en début de pas pour le calcul de l'opérateur
// tangent
Fe0 = Fe;
// Estimation du tenseur d'élasticité en fin de pas
Fe_tr = dF*Fe0;
// Tenseur de déformation élastique de Green-Lagrange en début de pas
eel = computeGreenLagrangeTensor(Fe);
// Paramètres généraux
real kb = 1.38064852E-23 ; // Constante de Boltzman en J/K
real nuD = 4.93565322130000e13; // Fréquence de Debye s-1
real a_maille = 5.47e-10; // Paramètre de maille en m
b = a_maille/pow(2,0.5); // Norme du vecteur de Burgers en m
mu = D(3,3)/2.; // Coefficient mu de Lamé
rho0 = 1.e14;
```

```

// Paramètres du mode {100}
rhom_1 = 6.2e12;
tau0_1 = 1.35e6;
DH0_1 = 9.15789473684e-19;
gp0_1 = rhom_1*nuD*b*b*exp(-DH0_1/(kb*T));
// Paramètres du mode {110}
rhom_2 = 9.2e11;
tau0_2 = 4.78e6;
DH0_2 = 8.36734693878e-19;
gp0_2 = rhom_2*nuD*b*b*exp(-DH0_2/(kb*T));
// Paramètres du mode {111}
rhom_3 = rhom_2;
tau0_3 = 3.5e6;
DH0_3 = DH0_2;
gp0_3 = rhom_3*nuD*b*b*exp(-DH0_3/(kb*T));
/** Intégrateur **/
@Integrator {
// Second tenseur de Piola-Kirchhoff
S = D*(eel+deel);

// Tenseur des contraintes de Mandel
const StrainTensor tmp(StrainTensor::Id() + 2*(eel+deel));
const StressTensor M = tmp*S;

// Appel aux systèmes de glissement
const SlidingSystems& ss = SlidingSystems::getSlidingSystems();
// Inversion du tenseur dFp
inv_dFp = Tensor::Id();
for(unsigned short i=0;i!=24;++i){
    inv_dFp -= dgam[i]*ss.mu[i];
}
// Tenseur gradient de la transformation élastique
Fe = Fe_tr*inv_dFp;
/** Calcul de la loi de vitesses par système s **/
real tau_foret;
real tau[24];
real v_s;
for (unsigned short s=0;s<24;s++) {
    if (s<6) {
        tau0 = tau0_1;
        gp0 = gp0_1;
    }
    else if ((s==6) & (s<12)){
        tau0 = tau0_2;
        gp0 = gp0_2;
    }
    else {
        tau0 = tau0_3;
        gp0 = gp0_3;
    }
    // Contrainte résolue sur le système s
    tau[s] = ss.mu[s] | M;
    real tau_s = abs(tau[s])/tau0;
    const real sgn_s = tau[s] >= 0 ? 1 : -1;
    if (tau_s > 1.e2) {
        tau[s] = tau0*sgn_s;
    }
    // Loi de vitesses du système s
    v_s = (cosh((tau[s])/tau0)-1.);
    // évolution du cisaillement au cours du temps
    if(abs(tau[s])/tau0)>1.e-20){
        del_gam[s] = gp0 * v_s * sgn_s *dt;
    } else {
        del_gam[s] = 0.;
    }
    fgam[s] = dgam[s] - del_gam[s];
}

feel = eel+deel-computeGreenLagrangeTensor(Fe);
}
/** Mise à jour des variables **/
@ComputeFinalStress{
const SlidingSystems& ss = SlidingSystems::getSlidingSystems();

// approximation de l'inverse de dF_p
inv_dFp = Tensor::Id();
for(unsigned short i=0;i!=Nss;++i)
{
    inv_dFp -= dgam[i]*ss.mu[i];
}
real J_inv_dFp = det(inv_dFp);
inv_dFp /= CubicRoots::cbrt(J_inv_dFp);

// Fe en fin de pas de temps
Fe = Fe_tr*inv_dFp;

// Calcul de la Rotation élastique
polar_decomposition(Re,Ue,Fe);

// Second tenseur de Piola-Kirchhoff
S = D*eel;

// Contrainte de Cauchy
sig = convertSecondPiolaKirchhoffStressToCauchyStress(S,Fe);
}

```

Annexe B

Procédure du tracé des rotations dans la figure de pôle inverse

Le principe du tracé des rotations dans une figure de pôle inverse (FPI) est de pouvoir repérer l'orientation du repère de compression dans le repère du cristal. Ce type de représentation est complémentaire à la figure de pôle directe (orientation du cristal dans le repère de compression). Les symétries cubiques du cristal permettent de réduire la visualisation à un seul triangle.

Repères et rotation lors d'un essai de compression

Ainsi considérons $R_0 = \{0, \vec{x}, \vec{y}, \vec{z}\}$, le repère de compression (ou repère échantillon) dans lequel la compression se fait suivant l'axe $\vec{z}$. Dans le cas d'un monocristal, l'orientation cristalline $\{\overline{100}, \overline{010}, \overline{001}\}$ est définie dans le cristal à partir du repère de compression (voir figure A.1). On note $R_{0 \rightarrow 1}$ la rotation qui permet de passer du repère de compression au repère du cristal. Après déformation, le repère du cristal ayant tourné on note $R_{1 \rightarrow 2}$ cette rotation qui est donné par la rotation élastique dans lors d'un calcul éléments finis.

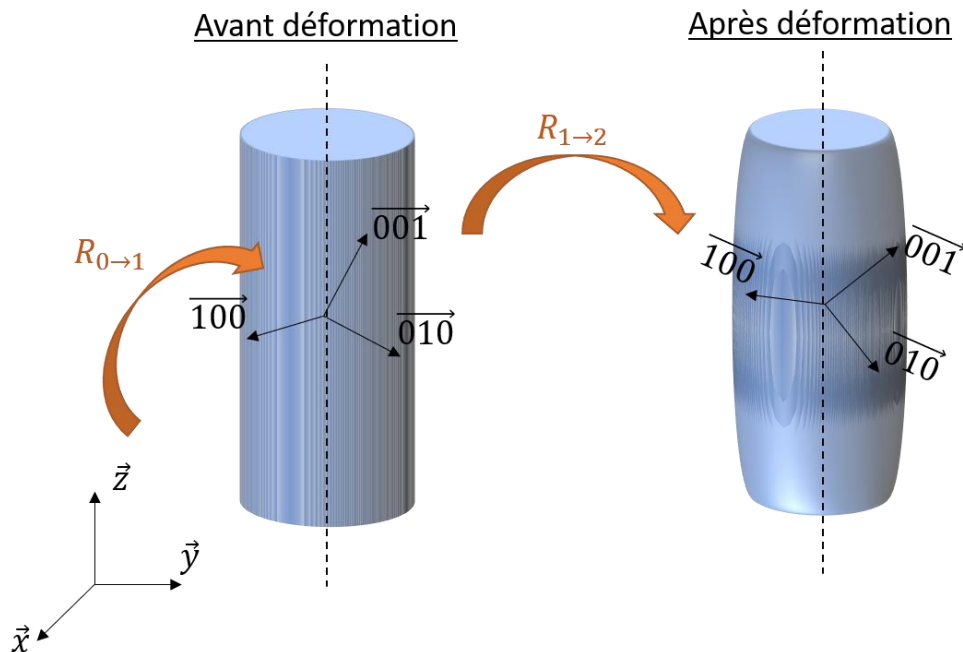


figure A.1 : Représentation des orientations cristallines dans le repère de compression avant et après déformation.

Tracé d'un FPI

Lorsque l'axe de compression est exprimé dans le repère du cristal par la formule $\vec{z}_1 = R_{0 \rightarrow 1} \vec{z}_0$, il suffit de normaliser le vecteur $\vec{z}_1$ puis de le projeter dans un plan de normale $\overline{001}$ à partir du point (-100) comme illustré sur la figure A.2. Pour illustrer la rotation après sollicitation, il faut dans un premier temps marquer le point l'origine sur la FPI. Ensuite, il faut faire tourner le vecteur $\vec{z}_1$ à l'aide de la rotation $R_{1 \rightarrow 2}$ pour obtenir l'orientation de l'axe de compression après déformation dans le repère cristallin : $\vec{z}_2 = R_{1 \rightarrow 2} \vec{z}_1$. Finalement, on projette ce vecteur sur la FPI nous permettant d'avoir le point final donnant la rotation par rapport au point d'origine.

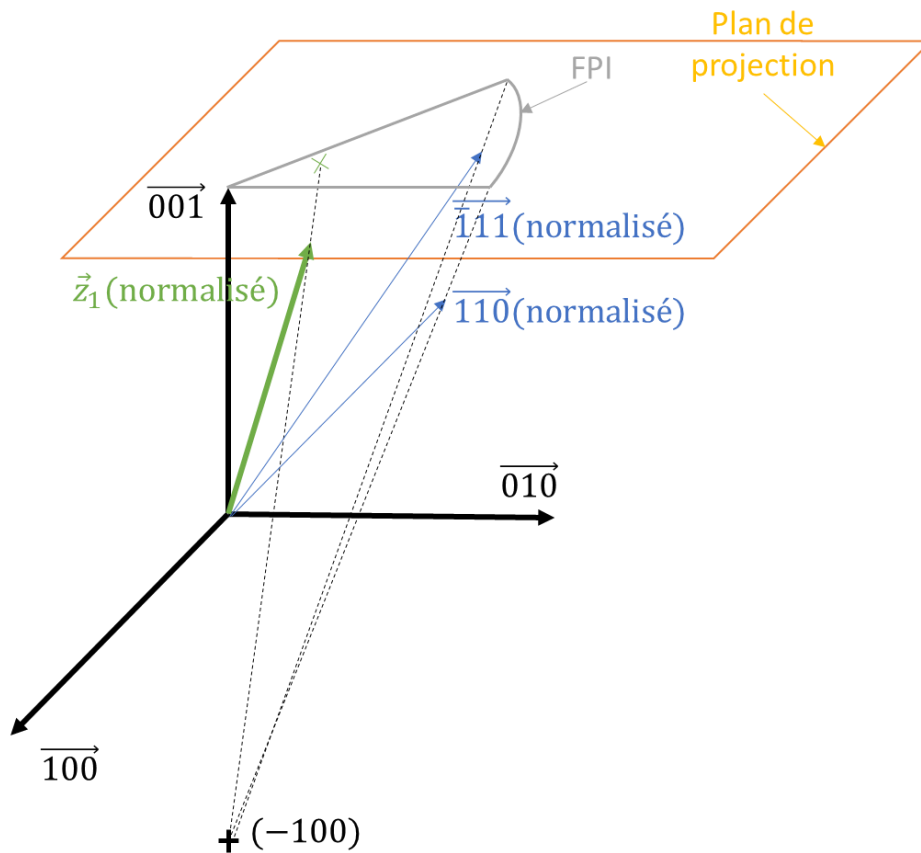


figure A.2 : Illustration de la projection d'un vecteur sur un plan de normale $\overline{001}$ à partir du point d'origine (-100) .

Calcul de la rotation moyenne après un calcul EF

Comme nous l'avons spécifié précédemment, nous extrayons la rotation moyenne après déformation sur les 10 éléments centraux de l'éprouvette. Avant déformation, l'orientation de chaque point d'intégration de ces dix éléments est la même, ainsi, un seul point marque l'origine avant déformation. Après déformation, l'orientation cristalline de chaque point d'intégration est différente (voir figure A.3) c'est pourquoi nous les projetons tous sur la FPI et faisons la moyenne des composantes de ces points afin d'avoir un point unique représentant la moyenne de la rotation.

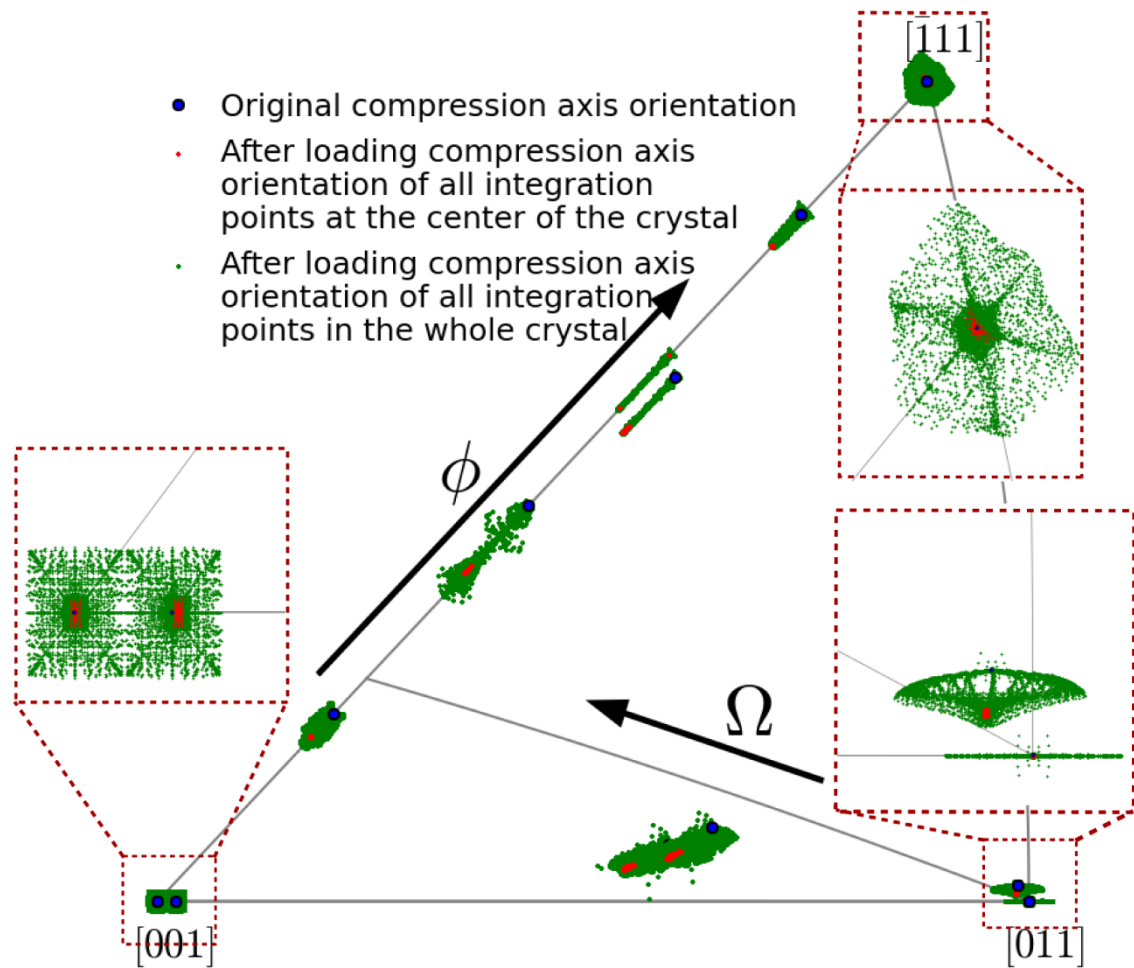


figure A.3 : Orientation cristalline après 2% de déformation. Les points verts représentent l'orientation cristalline de chaque point d'intégration sur l'ensemble du maillage de l'éprouvette. Les points rouges représentent l'orientation cristalline de chaque point d'intégration des dix éléments au centre de l'éprouvette EF.

Annexe C

Simulation EF – $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{111\}$ intermédiaire (cas 4)

Cette annexe détaille les résultats de simulation lorsque l'activation des systèmes $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{111\}$ est intermédiaire entre les systèmes du mode $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{100\}$ le plus mou et du mode $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{110\}$ le plus dur. Les valeurs des paramètres sont données dans le tableau B.0.1, l'influence de ces paramètres sur la CRSS en fonction de la température est donnée sur la figure B.1 et les résultats de simulation EF lors de l'étude d'anisotropie sont donnés en figure B.2.

tableau B.0.1 : Valeur des paramètres du modèle lorsque les systèmes $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{111\}$ ont une activation intermédiaire aux systèmes $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{100\}$ le plus mou et $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{110\}$. CRSS à 1600K lorsque en considérant un facteur de Schmid de 0,5 et une vitesse de déformation de 10^{-4} s^{-1}

	$\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{100\}$	$\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{110\}$	$\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{111\}$
$\rho_m^s (\text{m}^{-2})$	$6,2 \cdot 10^{12}$	$9,2 \cdot 10^{11}$	$9,2 \cdot 10^{11}$
$\Delta H_0^i (\text{eV})$	5,71	5,22	5,22
$\tau_0^i (\text{MPa})$	1,35	4,78	3,5
CRSS (MPa) à 1600 K	21,7	68,4	50,1

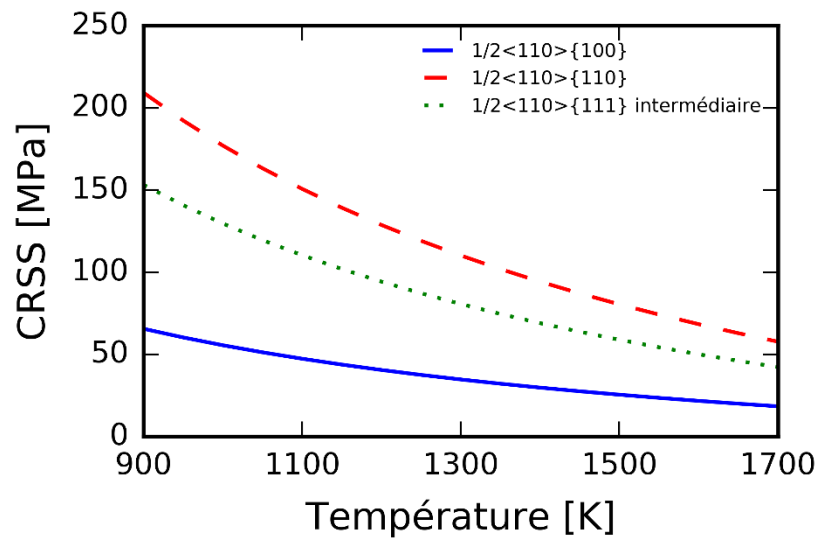


figure B.1 : Illustration de l'activation des différents modes pour l'étude paramétrique de $\{111\}$ avec les courbes de CRSS en fonction de la température. La courbe bleue pleine représente l'activation des systèmes $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{100\}$, la rouge en tirets représente l'activation de $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{110\}$ dans et la verte en pointillés représente l'activation de $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{111\}$.

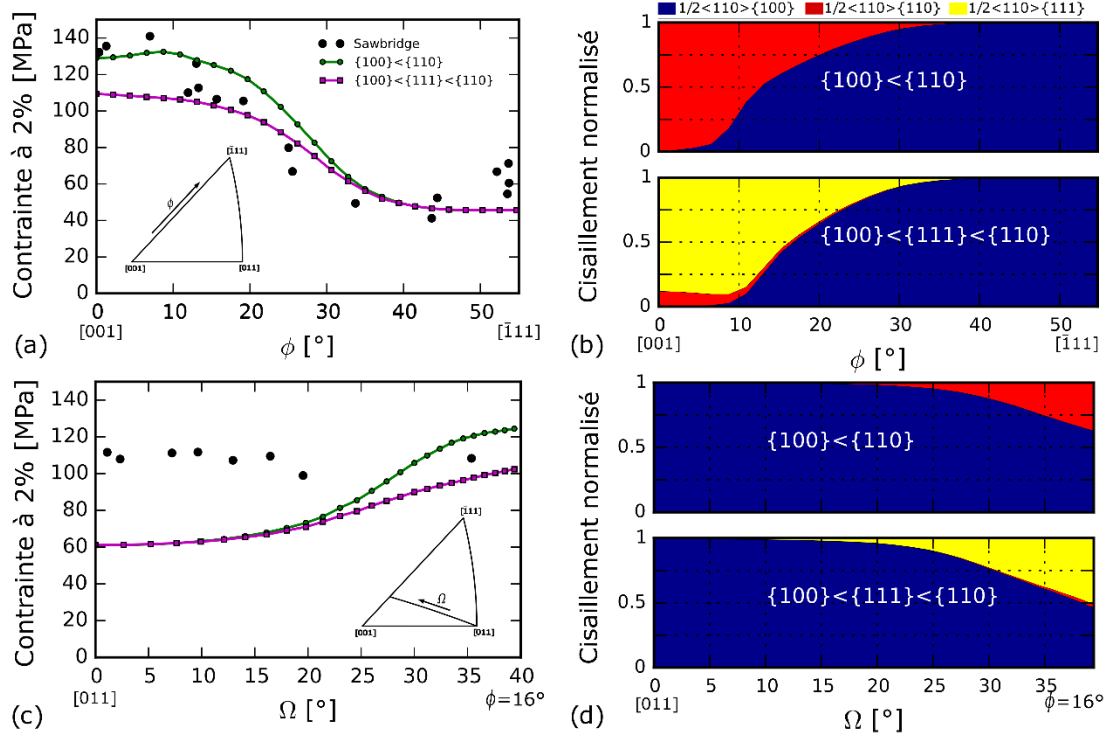


figure B.2 : Comparaison de l'anisotropie viscoplastique à 2% de déformation entre la simulation EF en considérant avec et sans le mode $\{111\}$ dans le cas d'une activation intermédiaire et les résultats expérimentaux de [Sawbridge et Sykes \(1971\)](#). (a) et (c) représentent l'anisotropie viscoplastique en fonction respectivement de ϕ et Ω . (b) et (d) représentent la contribution du cisaillement en fonction respectivement de ϕ et Ω .

Annexe D

Base de vecteurs pour les trois modes de glissement

Afin de définir les lignes de dislocations sur le réseau élémentaire de la boîte de DD, il faut définir l'ensemble des vecteurs lignes que peut avoir un segment sur un plan de glissement, comme illustré en figure C.1. Chaque vecteur ligne est associé à un vecteur déplacement. Nous avons donné dans les tableaux C.1 à C.3 les bases de vecteur associées aux trois systèmes mobiles utilisés lors des simulations pour calculer les coefficients de la matrice d'interaction.

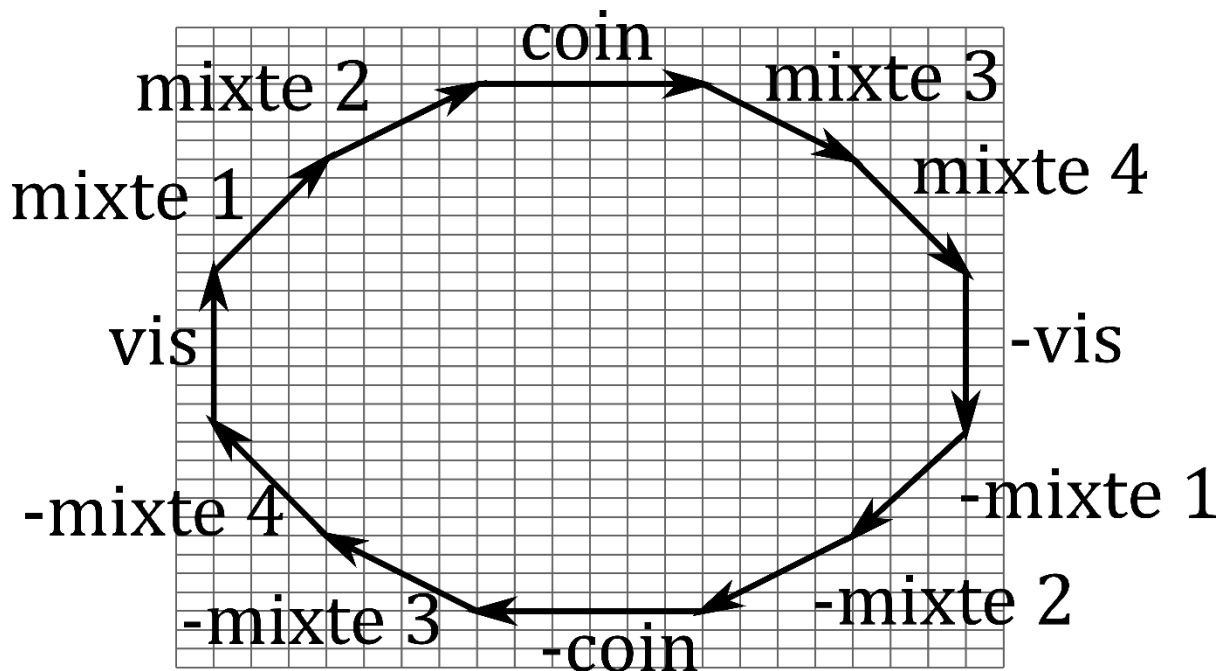


figure C.1 : Schéma d'un boucle 2D donnée par une base de vecteur de ligne sur un réseau élémentaire en gris.

tableau C.0.1 : Base de vecteurs pour les systèmes mobiles $\frac{1}{2}[011](100)$.

Système mobile de mode {100}		
Dans le réseau		Dans la base de vecteur tournée
$[011](100)$		$[4 \ 11 \ 5](\bar{1}\bar{4}8)$
Base de vecteur		
Caractère	Vecteur ligne	Vecteur déplacement
Vis	-24 66 30	-36 -9 -9
Mixte 1	-48 24 6	-24 -42 -24
Coin	-72 -18 -18	12 -33 -15
Mixte 2	-24 -42 -24	48 -24 -6
- Vis	24 -66 -30	36 9 9
- Mixte 1	48 -24 -6	24 42 24
- Coin	72 18 18	-12 33 15
- Mixte 2	24 42 24	-48 24 6

tableau C.0.2 : Base de vecteurs pour les systèmes mobiles $[011](0\bar{1}1)$.

Système mobile de mode {110}		
Dans le réseau		Dans la base de vecteur tournée
[011](0 $\bar{1}$ 1)		[$\bar{4}$ 11 5](12 3 3)
Base de vecteur		
Caractère	Vecteur ligne	Vecteur déplacement
Vis	-24 66 30	-6 -24 48
Mixte 1	-30 42 78	4 -38 22
Mixte 2	-36 18 126	6 -30 6
Coin	-6 -24 48	24 -66 -30
Mixte 3	12 -114 66	10 -14 -26
Mixte 4	18 -90 18	12 -6 -42
- Vis	24 -66 -30	6 24 -48
- Mixte 1	30 -42 -78	-4 38 -22
- Mixte 2	36 -18 -126	-6 30 -6
- Coin	6 24 -48	-24 66 30
- Mixte 3	-12 114 -66	-10 14 26
- Mixte 4	-18 90 -18	-12 6 42

tableau C.0.3 : Base de vecteurs pour les systèmes mobiles $[\bar{1}01](111)$

Système mobile de mode {110}		
Dans le réseau		Dans la base de vecteur
$[\bar{1}01](111)$		$[\bar{6}06](666)$
Base de vecteur		
Caractère	Vecteur ligne	Vecteur déplacement
Vis	6 0 -6	-3 6 -3
Mixte 1	6 6 -12	-3 3 0
Mixte 2	0 6 -6	-6 3 3
Coin	-6 12 -6	-3 0 3
Mixte 3	-6 6 0	-3 -3 6
Mixte 4	-12 6 6	0 -3 3
- Vis	-6 0 6	3 -6 3
- Mixte 1	-6 -6 12	3 -3 0
- Mixte 2	0 -6 6	6 -3 -3
- Coin	6 -12 6	3 -3 -3
- Mixte 3	6 -6 0	3 3 -6
- Mixte 4	12 -6 -6	0 3 -3

Bibliographie

- Acharya, A. et A. J. Beaudoin. « Grain-Size Effect in Viscoplastic Polycrystals at Moderate Strains ». *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 48, no 10 (2000), 2213-30. doi:10.1016/S0022-5096(00)00013-2.
- Alamo, A., J. M. Lefebvre et J. Soullard. « Deformation plastique du bioxyde d'uranium: Observation des sous-structures de dislocations ». *Journal of Nuclear Materials* 75, no 1 (1978), 145-53. doi:10.1016/0022-3115(78)90038-7.
- Alankar, A., I. N. Mastorakos, D. P. Field et H. M. Zbib. « Determination of Dislocation Interaction Strengths Using Discrete Dislocation Dynamics of Curved Dislocations ». *Journal of Engineering Materials and Technology* 134, no 2 (2012), 021018-021018-4. doi:10.1115/1.4005917.
- Alexander, H. et J. L. Crawford. « Latent Hardening of Germanium Crystals ». *Physica Status Solidi (B)* 222, no 1 (2000), 41-49. doi:10.1002/1521-3951(200011)222:1<41::AID-PSSB41>3.0.CO;2-U.
- Amodeo, J. « Modélisation multi-échelle de la déformation plastique de MgO monocristallin: du laboratoire au manteau terrestre ». Université de Lille Sciences et Technologies, 2011.
- Amodeo, J., S. Dancette et L. Delannay. « Atomistically-informed crystal plasticity in MgO polycrystals under pressure ». *International Journal of Plasticity* 82 (1 juillet 2016), 177-91. doi:10.1016/j.ijplas.2016.03.004.
- Amodeo, J., B. Devincere, Ph. Carrez et P. Cordier. « Dislocation Reactions, Plastic Anisotropy and Forest Strengthening in MgO at High Temperature ». *Mechanics of Materials* 71 (2014), 62-73. doi:10.1016/j.mechmat.2014.01.001.
- Armstrong, W. M. et W. R. Irvine. « Creep deformation of non-stoichiometric uranium dioxide ». *Journal of Nuclear Materials* 9, no 2 (1963), 121-27. doi:10.1016/0022-3115(63)90127-2.
- Armstrong, W. M., W. R. Irvine et R. H. Martinson. « Creep deformation of stoichiometric uranium dioxide ». *Journal of Nuclear Materials* 7, no 2 (1962), 133-41. doi:10.1016/0022-3115(62)90158-7.
- Arsenlis, A et D. M Parks. « Crystallographic aspects of geometrically-necessary and statistically-stored dislocation density ». *Acta Materialia* 47, no 5 (1999), 1597-1611. doi:10.1016/S1359-6454(99)00020-8.
- Ashby, M. F. « The deformation of plastically non-homogeneous materials ». *The Philosophical Magazine: A Journal of Theoretical Experimental and Applied Physics* 21, no 170 (1970), 399-424. doi:10.1080/14786437008238426.
- Aubry, S. et A. Arsenlis. « Use of Spherical Harmonics for Dislocation Dynamics in Anisotropic Elastic Media ». *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering* 21, no 6 (2013), 065013. doi:10.1088/0965-0393/21/6/065013.

- Aubry, S., S. P. Fitzgerald, S. L. Dudarev et W. Cai. « Equilibrium Shape of Dislocation Shear Loops in Anisotropic α -Fe ». *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering* 19, no 6 (2011), 065006. doi:10.1088/0965-0393/19/6/065006.
- Aurenhammer, F. « Power Diagrams: Properties, Algorithms and Applications ». *SIAM Journal on Computing* 16, no 1 (1987), 78-96. doi:10.1137/0216006.
- Bacon, D. J., D. M. Barnett et R. O. Scattergood. « Anisotropic continuum theory of lattice defects ». *Progress in Materials Science* 23 (1980), 51-262. doi:10.1016/0079-6425(80)90007-9.
- Basinski, S.J. et Z.J. Basinski. « Plastic deformation and work hardening, in Dislocations in Solids par F.R.N Nabarro, amsterdam ». *North-Holland Publishing Compagny* 4 (1979), 261-362.
- Ben Saada, M. « Etude du comportement visco-plastique du dioxyde d'uranium : Quantification par analyse EBSD et ECCI des effets liés aux conditions de sollicitation et à la microstructure initiale ». Université de Lorraine, 2017.
- Bertin, N., C. N. Tomé, I. J. Beyerlein, M. R. Barnett et L. Capolungo. « On the strength of dislocation interactions and their effect on latent hardening in pure Magnesium ». *International Journal of Plasticity* 62 (2014), 72-92. doi:10.1016/j.ijplas.2014.06.010.
- Bohaboy, P. E., R. R. Asamoto et A. E. Conti. « Compressive Creep Characteristics of Stoichiometric Uranium Dioxide ». Report. *Other Information: UNCL. Orig. Receipt Date: 31-DEC-70*, 1969. doi:10.2172/4716019.
- Bouloire, A. « Etude et modélisation de la densification en pile des oxydes nucléaires UO₂ et MOX ». Thèse, INP Grenoble et ENS Mines de Saint Etienne, 2001.
- Brown, N. et R. A. Ekvall. « Temperature Dependence of Yield Points in Iron ». *Acta Metallurgica* 10 (1962), 1101-. doi:10.1016/0001-6160(62)90078-0.
- Burn, R. et G. T. Murray. « Plasticity and Dislocation Etch Pits in CaF₂ ». *Journal of the American Ceramic Society* 45, no 5 (1962), 251-52. doi:10.1111/j.1151-2916.1962.tb11137.x.
- Burton, B., G. L. Reynolds et J. P. Barnes. « The Influence of Grain Size on the Creep of Uranium Dioxide ». *Journal of Materials Science* 8, no 12 (1973), 1690-94. doi:10.1007/BF02403517.
- Busso, E. P., F. T. Meissonnier et N. P. O'Dowd. « Gradient-Dependent Deformation of Two-Phase Single Crystals ». *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 48, no 11 (2000), 2333-61. doi:10.1016/S0022-5096(00)00006-5.
- Byron, J. F. « The yield and flow of single crystals of uranium dioxide ». *Journal of Nuclear Materials* 28, no 1 (1968a), 110-14. doi:10.1016/0022-3115(68)90062-7.
- Byron, J. F. « Yield and flow of polycrystalline uranium dioxide ». *Journal of Nuclear Materials* 27, no 1 (1968b), 48-53. doi:10.1016/0022-3115(68)90006-8.

- Castelier, E. « Homogénéisation des propriétés thermoélastiques des combustibles CERMET ». Note Technique. CEA, 2007.
- Choi, Y. S., D. M. Dimiduk, M. D. Uchic et T. A. Parthasarathy. « Modelling plasticity of Ni3Al-based L12 intermetallic single crystals. I. Anomalous temperature dependence of the flow behaviour ». *Philosophical Magazine* 87, no 12 (2007a), 1939-65. doi:10.1080/14786430601169782.
- Chung, T. E. et T. J. Davies. « The low-stress creep of fine-grain uranium dioxide ». *Acta Metallurgica* 27, no 4 (1979), 627-35. doi:10.1016/0001-6160(79)90014-2.
- Coble, R. L. « A Model for Boundary Diffusion Controlled Creep in Polycrystalline Materials ». *Journal of Applied Physics* 34, no 6 (1963), 1679-82. doi:10.1063/1.1702656.
- Commissariat à l'énergie atomique (CEA). « Cast3m, Finite Element Software », s. d. www.cast3M.cea.fr.
- Cottrell, A. H. « Theory of dislocations ». *Progress in Metal Physics* 4 (1953), 205-64. doi:10.1016/0502-8205(53)90018-5.
- Demouchy, S., A. Mussi, F. Barou, A. Tommasi et P. Cordier. « Viscoplasticity of polycrystalline olivine experimentally deformed at high pressure and 900°C ». *Tectonophysics* 623 (2014), 123-35. doi:10.1016/j.tecto.2014.03.022.
- Dequiedt, J. L., C. Denoual et R. Madec. « Heterogeneous Deformation in Ductile FCC Single Crystals in Biaxial Stretching: The Influence of Slip System Interactions ». *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 83 (2015), 301-18. doi:10.1016/j.jmps.2015.05.020.
- Devincre, B. « Dislocation dynamics simulations of slip systems interactions and forest strengthening in ice single crystal ». *Philosophical Magazine* 93, no 1-3 (2013), 235-46. doi:10.1080/14786435.2012.699689.
- Devincre, B. « Three dimensional stress field expressions for straight dislocation segments ». *Solid State Communications* 93, no 11 (1995), 875-78. doi:10.1016/0038-1098(94)00894-9.
- Devincre, B., T. Hoc et L. P. Kubin. « Dislocation Mean Free Paths and Strain Hardening of Crystals ». *Science* 320, no 5884 (2008), 1745-48. doi:10.1126/science.1156101.
- Devincre, B., L. P. Kubin et T. Hoc. « Collinear Superjogs and the Low-Stress Response of Fcc Crystals ». *Scripta Materialia* 57, no 10 (2007), 905-8. doi:10.1016/j.scriptamat.2007.07.026.
- Devincre, B., L. P. Kubin et T. Hoc. « Physical analyses of crystal plasticity by DD simulations ». *Scripta Materialia*, Viewpoint set no. 39: Statistical mechanics and coarse graining of dislocation behavior for continuum plasticity, 54, no 5 (2006), 741-46. doi:10.1016/j.scriptamat.2005.10.066.

- deWit, G. et J. S. Koehler. « Interaction of Dislocations with an Applied Stress in Anisotropic Crystals ». *Physical Review* 116, no 5 (1959), 1113-20. doi:10.1103/PhysRev.116.1113.
- Dherbey, F., F. Louchet, A. Mocellin et S. Leclercq. « Elevated temperature creep of polycrystalline uranium dioxide: from microscopic mechanisms to macroscopic behaviour ». *Acta Materialia* 50, no 6 (2002), 1495-1505. doi:10.1016/S1359-6454(02)00007-1.
- Douin, J. « DisDi », s. d. <http://joel.douin.free.fr/Disdi-Page.html>.
- Douin, J., P. Veyssiere et P. Beauchamp. « Dislocation line stability in Ni₃Al ». *Philosophical Magazine A* 54, no 3 (1986), 1375-93. <https://www.tandfonline.com/doi/abs/10.1080/01418618608240722>.
- Dupuy, L. et M. C. Fivel. « A study of dislocation junctions in FCC metals by an orientation dependent line tension model ». *Acta Materialia* 50, no 19 (2002), 4873-85. doi:10.1016/S1359-6454(02)00356-7.
- Edington, J. W. et M. J. Klein. « Slip and Fracture in Single Crystals of Thoria ». *Journal of Applied Physics* 37, no 10 (1966), 3906-. doi:10.1063/1.1707946.
- Eser, E., H. Koc, M. Gokbulut et G. Gursoy. « Estimations of Heat Capacities for Actinide Dioxide: UO₂, NpO₂, ThO₂, AND PuO₂ ». *Nuclear Engineering and Technology* 46, no 6 (2014), 863-68. doi:10.5516/NET.07.2014.024.
- Evans, A. G et P. L. Pratt. « Dislocations in Fluorite Structure ». *Philosophical Magazine* 20, no 168 (1969), 1213-. doi:10.1080/14786436908228207.
- Evers, L. P., W. a. M. Brekelmans et M. G. D. Geers. « Scale Dependent Crystal Plasticity Framework with Dislocation Density and Grain Boundary Effects ». *International Journal of Solids and Structures* 41, no 18-19 (2004), 5209-30. doi:10.1016/j.ijsolstr.2004.04.021.
- Fivel, M. et S. Forest. *Plasticite Cristalline Et Transition D'échelle : Cas Du Monocristal*. Ed. Techniques Ingénieur, 2004.
- Fossati, P. « Contributioin à l'étude des propriétés mécaniques du combustible nucléaire : Modélisation atomistique de la déformation du dioxyde d'uranium ». Ecole centrale des arts, 2012.
- Franciosi, P. et A. Zaoui. « Multislip in Fcc Crystals a Theoretical Approach Compared with Experimental-Data ». *Acta Metallurgica* 30, no 8 (1982), 1627-37. doi:10.1016/0001-6160(82)90184-5.
- Friedel, J. *Dislocations*. Pergamon Press, 1967. Google-Books-ID: y3ngAAAAMAAJ.
- Frost, H.J et M. F. Ashby. *Deformation-mechanism maps - The plasticity and creep of metals and ceramics*. Pergamon press, 1982.

- Fusenig, K. D. et E. Nembach. « Dynamic dislocation effects in precipitation hardened materials ». *Acta Metallurgica et Materialia* 41, no 11 (1993), 3181-89. doi:10.1016/0956-7151(93)90048-W.
- Gilbert, A. « Deformation and Fracture of Thoria ». *Philosophical Magazine* 12, no 115 (1965), 139-. doi:10.1080/14786436508224954.
- Grønvold, F. « High-temperature X-ray study of uranium oxides in the UO₂-U₃O₈ region ». *Journal of Inorganic and Nuclear Chemistry* 1, no 6 (1955), 357-70. doi:10.1016/0022-1902(55)80046-2.
- Guerin, Y. « Etude par compression a hautes temperatures de la deformation plastique du bioxyde d'uranium polycristallin », 1975. <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/002231157590197X>.
- Guyot, P. et J. E. Dorn. « A Critical Review of Peierls Mechanism ». *Canadian Journal of Physics* 45, no 2P3 (1967), 983-. doi:10.1139/p67-073.
- Hall, E. O. « The Deformation and Ageing of Mild Steel: III Discussion of Results ». *Proceedings of the Physical Society. Section B* 64, no 9 (1951), 747. doi:10.1088/0370-1301/64/9/303.
- Helfer, T. « MFront a code generation tool dedicated to material knowledge », s. d. <http://tfel.sourceforge.net/>.
- Helfer, T., B. Michel, J-M. Proix, M. Salvo, J. Sercombe et M. Casella. « Introducing the open-source mfront code generator: Application to mechanical behaviours and material knowledge management within the PLEIADES fuel element modelling platform ». *Computers & Mathematics with Applications* 70, no 5 (2015), 994-1023. doi:10.1016/j.camwa.2015.06.027.
- Herring, C. « Diffusional Viscosity of a Polycrystalline Solid ». *Journal of Applied Physics* 21, no 5 (1950), 437-45. doi:10.1063/1.1699681.
- Hoc, T., J. Crépin, L. Gélébart et A. Zaoui. « A procedure for identifying the plastic behavior of single crystals from the local response of polycrystals ». *Acta Materialia* 51, no 18 (2003), 5477-88. doi:10.1016/S1359-6454(03)00413-0.
- Hutchings, M. T. « High-Temperature Studies of UO₂ and ThO₂ Using Neutron Scattering Techniques ». *Journal of the Chemical Society, Faraday Transactions 2: Molecular and Chemical Physics* 83, no 7 (1987), 1083-1103. doi:10.1039/F29878301083.
- Ibrahim, M. « Etude du comportement mécanique d'UO₂ implanté en hélium par micro-diffraction des rayons X et modélisation par éléments finis ». Université Paris-Est, 2015.
- Igata, N. et K. Domoto. « Fracture stress and elastic modulus of uranium dioxide including excess oxygen ». *Journal of Nuclear Materials* 45, no 4 (1973), 317-22. doi:10.1016/0022-3115(73)90165-7.

- Ikeno, S. et E. Furubayashi. « Dislocation Behavior in Pure Niobium at Low Temperatures ». *Physica Status Solidi (A)* 27, no 2 (1975), 581-90. doi:10.1002/pssa.2210270229.
- Iltis, X., N. Gey, C. Cagna, A. Hazotte et Ph. Sornay. « Microstructural evolution of uranium dioxide following compression creep tests: An EBSD and image analysis study ». *Journal of Nuclear Materials* 456 (2015), 426-35. doi:10.1016/j.jnucmat.2014.10.005.
- Jonas, J. J., C. M. Sellars et W. J. McG. Tegart. « Strength and structure under hot-working conditions ». *Metallurgical Reviews* 14, no 1 (1969), 1-24. doi:10.1179/mtlr.1969.14.1.1.
- Kanit, T., S. Forest, I. Galliet, V. Mounoury et D. Jeulin. « Determination of the size of the representative volume element for random composites: statistical and numerical approach ». *International Journal of Solids and Structures* 40, no 13 (2003), 3647-79. doi:10.1016/S0020-7683(03)00143-4.
- Keig, G. A. et R. L. Coble. « Mobility of Edge Dislocations in Single-Crystal Calcium Fluoride ». *Journal of Applied Physics* 39, no 13 (1968), 6090-. doi:10.1063/1.1656121.
- Keller, C., E. Hug, A. M. Habraken et L. Duchene. « Finite Element Analysis of the Free Surface Effects on the Mechanical Behavior of Thin Nickel Polycrystals ». *International Journal of Plasticity* 29 (2012), 155-72. doi:10.1016/j.ijplas.2011.08.007.
- Keller, R. J., T. E. Mitchell et A. H. Heuer. « Plastic deformation in nonstoichiometric UO_{2+x} single crystals—I. Deformation at low temperatures ». *Acta Metallurgica* 36, no 4 (1988a), 1061-71. doi:10.1016/0001-6160(88)90160-5.
- Keller, R. J., T. E. Mitchell et A. H. Heuer. « Plastic deformation in nonstoichiometric $\text{UO}_2 + x$ single crystals—II. Deformation at high temperatures ». *Acta Metallurgica* 36, no 4 (1988b), 1073-83. doi:10.1016/0001-6160(88)90161-7.
- Knezevic, M., I. J. Beyerlein, D. W. Brown, Thomas A. Sisneros et Carlos N. Tomé. « A polycrystal plasticity model for predicting mechanical response and texture evolution during strain-path changes: Application to beryllium ». *International Journal of Plasticity* 49 (2013), 185-98. doi:10.1016/j.ijplas.2013.03.008.
- Knorr, D. B., R. M. Cannon et R. L. Coble. « Overview no. 84: An analysis of diffusion and diffusional creep in stoichiometric and hyperstoichiometric uranium dioxide ». *Acta Metallurgica* 37, no 8 (1989), 2103-23. doi:10.1016/0001-6160(89)90136-3.
- Koc, H., E. Eser et B. A. Mamedov. « Calculation of Heat Capacity of the Nuclear Fuels UO_2 and NpO_2 Using Integer and Non-Integer n-Dimensional Debye Functions ». *Nuclear Engineering and Design* 241, no 9 (2011), 3678-82. doi:10.1016/j.nucengdes.2011.07.020.

- Kocks, U. F. « Laws for Work-Hardening and Low-Temperature Creep ». *Journal of Engineering Materials and Technology* 98, no 1 (1976), 76-85. doi:10.1115/1.3443340.
- Kocks, U. F., A. S. Argon et M. F. Ashby. « Thermodynamics and Kinetics of Slip ». *Progress in Materials Science* 19 (1975), 1-281.
- Kocks, U. F. et H. Mecking. « Physics and phenomenology of strain hardening: the FCC case ». *Progress in Materials Science* 48, no 3 (2003), 171-273. doi:10.1016/S0079-6425(02)00003-8.
- Kroner, E. « Allgemeine Kontinuumstheorie Der Versetzungen Und Eigenspannungen ». *Archive for Rational Mechanics and Analysis* 4, no 4 (1960), 273-334.
- Kroupa, F. « The Force between Non-Parallel Dislocations ». *Czechoslovakij Fiziceskij Zurnal B* 11, no 11 (1961), 847-48. doi:10.1007/BF01690051.
- Kubin, L. P., G. Canova, M. Condat, B. Devincere, V. Pontikis et Y. Bréchet. « Dislocation Microstructures and Plastic Flow: A 3D Simulation ». *Solid State Phenomena*, 1992. doi:10.4028/www.scientific.net/SSP.23-24.455.
- Kubin, L. P., B. Devincere et T. Hoc. « Modeling dislocation storage rates and mean free paths in face-centered cubic crystals ». *Acta Materialia* 56, no 20 (2008), 6040-49. doi:10.1016/j.actamat.2008.08.012.
- Kubin, L. P., R. Madec et B. Devincere. « Dislocation Intersections and Reactions in FCC and BCC Crystals ». Dans *Symposium W – Multiscale Phenomena in Materials - Experiments and Modeling Related to Mechanical Behavior*, 779:W1.6 (12 pages). MRS Online Proceedings Library Archive, 2003. doi:10.1557/PROC-779-W1.6.
- Lautensack, C. et S. Zuyev. « Random Laguerre Tessellations ». *Advances in Applied Probability* 40, no 3 (2008), 630-50. doi:10.1239/aap/1222868179.
- Lee, E. H. « Elastic-Plastic Deformation at Finite Strains ». *Journal of Applied Mechanics* 36, no 1 (1969), 1-. doi:10.1115/1.3564580.
- Lefebvre, J. M. « Contribution à l'étude de la déformation plastique d'une céramique de structure fluorite : le bioxyde d'uranium ». Faculté des sciences de poitiers, 1976.
- Lemaitre, J et J.L Chaboche. *Mécanique des matériaux solides*, 1996. <https://www.dunod.com/sciences-techniques/mecanique-materiaux-solides>.
- Ling, C., J. Besson, S. Forest, B. Tanguy, F. Latourte et E. Bosso. « An elastoviscoplastic model for porous single crystals at finite strains and its assessment based on unit cell simulations ». *International Journal of Plasticity* 84 (2016), 58-87. doi:10.1016/j.ijplas.2016.05.001.
- Liu, T. S. et C. H. Li. « Plasticity of Barium Fluoride Single Crystals ». *Journal of Applied Physics* 35, no 11 (1964), 3325-30. doi:10.1063/1.1713217.

- Loridon, S. « Intégration de l'anisotropie élastique dans le code de dynamique des dislocations MobiDiC ». Rapport de stage. CEA/DAM, 2016.
- Lorne, Q. « Etude de l'écrouissage des métaux hexagonaux par Dynamique des Dislocations ». Rapport de stage. Université de technologie de Troyes, 2016.
- Louchet, F., L. P. Kubin et D. Vesely. « In situ deformation of b.c.c. crystals at low temperatures in a high-voltage electron microscope Dislocation mechanisms and strain-rate equation ». *Philosophical Magazine A* 39, no 4 (1979), 433-54. doi:10.1080/01418617908239283.
- Lunev, A. V., A. Yu Kuksin et S. V. Starikov. « Glide Mobility of the $1/2[1101(001)]$ Edge Dislocation in UO₂ from Molecular Dynamics Simulation ». *International Journal of Plasticity* 89 (2017), 85-95. doi:10.1016/j.ijplas.2016.11.004.
- Madec, R. « Des interactions entre dislocations à la plasticité du monocristal CFC ; Etude par Dynamique des Dislocations ». Université Paris XI UFR Scientifique d'Orsay, 2001.
- Madec, R., B. Devincere et L. P. Kubin. *On the Use of Periodic Boundary Conditions in Dislocation Dynamics Simulations*. Sous la direction de H. Kitagawa et Y. Shibutani. Vol. 115. Dordrecht: Springer, 2004.
- Madec, R., B. Devincere et L. P. Kubin. « From Dislocation Junctions to Forest Hardening ». *Physical Review Letters* 89, no 25 (2002a), 255508. doi:10.1103/PhysRevLett.89.255508.
- Madec, R., B. Devincere et L. P. Kubin. « On the nature of attractive dislocation crossed states ». *Computational Materials Science* 23, no 1 (2002b), 219-24. doi:10.1016/S0927-0256(01)00215-4.
- Madec, R., B. Devincere et L. P. Kubin. « Simulation of dislocation patterns in multislip ». *Scripta Materialia* 47, no 10 (2002c), 689-95. doi:10.1016/S1359-6462(02)00185-9.
- Madec, R., B. Devincere, L. P. Kubin, T. Hoc et D. Rodney. « The Role of Collinear Interaction in Dislocation-Induced Hardening ». *Science* 301, no 5641 (2003), 1879-82. doi:10.1126/science.1085477.
- Madec, R. et L. P. Kubin. « Dislocation Strengthening in FCC Metals and in BCC Metals at High Temperatures ». *Acta Materialia* 126 (2017), 166-73. doi:10.1016/j.actamat.2016.12.040.
- Madec, R. et L. P. Kubin. *Dislocation Interactions and Symmetries in Bcc Crystals*. Sous la direction de H. Kitagawa et Y. Shibutani. Vol. 115. Dordrecht: Springer, 2004.
- Madec, R., P. Veyssière et G. Saada. « Frank-Read source mechanism, mobile dislocation density exhaustion and flow stress anomaly in L12 alloys: a dislocation dynamics study ». *Philosophical Magazine* 93, no 1-3 (2013), 222-34. doi:10.1080/14786435.2012.699692.

- Mandel, J. « Equations constitutives et directeurs dans les milieux plastiques et viscoplastiques ». *International Journal of Solids and Structures* 9, no 6 (1973), 725-40. doi:10.1016/0020-7683(73)90120-0.
- Martin, D.G. « The elastic constants of polycrystalline UO₂ and (U,Pu) mixed oxides : a review and recommendations ». *High Temperatures - High Pressures* 21 (1989), 13-24.
- Messerschmidt, U. « Dislocation Dynamics During Plastic Deformation ». *CERN Document Server*, 2010. doi:10.1007/978-3-642-03177-9, 10.1007/978-3-642-03177-9.
- Michel, B., T. Helfer, I. Ramière et C. Esnoul. « A new numerical methodology for simulation of unstable crack growth in time independent brittle materials ». *Engineering Fracture Mechanics* 188 (2018), 126-50. doi:10.1016/j.engfracmech.2017.08.009.
- Michel, B., C. Nonon, J. Sercombe, F. Michel et V. Marelle. « Simulation of Pellet-Cladding Interaction with the Pleiades Fuel Performance Software Environment ». *Nuclear Technology* 182, no 2 (2013), 124-37. doi:10.13182/NT13-A16424.
- Mitchell, T. E., R. A. Foxall et P. B. Hirsch. « Work-hardening in niobium single crystals ». *The Philosophical Magazine: A Journal of Theoretical Experimental and Applied Physics* 8, no 95 (1963), 1895-1920. doi:10.1080/14786436308209081.
- Monerie, Y. et J. M. Gatt. « Overall Viscoplastic Behavior of Non-Irradiated Porous Nuclear Ceramics ». *Mechanics of Materials* 38, no 7 (2006), 608-19. doi:10.1016/j.mechmat.2005.11.004.
- Monnet, G., L. Vincent et B. Devincre. « Dislocation-dynamics based crystal plasticity law for the low- and high-temperature deformation regimes of bcc crystal ». *Acta Materialia* 61, no 16 (2013), 6178-90. doi:10.1016/j.actamat.2013.07.002.
- Montheillet, F. « Métallurgie en mise en forme à chaud ». Text. Ref: *TIP552WEB* - « *Mise en forme des métaux et fonderie* », 2009. <https://www.techniques-ingenieur.fr/base-documentaire/42476210-mise-en-forme-des-metaux-aspects-rheologiques-et-metallurgiques/download/m3031/metallurgie-en-mise-en-forme-a-chaud.html>.
- Naamane, S. « Etude de la déformation plastique de la ferrite a basse temperature : Simulation de Dynamique des Dislocations ». Université Pierre et Marie Curie, 2008.
- Nabarro, F. R. N. « Deformation of crystals by the motion of single ions ». Report of a conference on the strength of solids. Physical Society of London, 1948.
- Nadeau, J. S. « Dependence of Flow Stress on Nonstoichiometry in Oxygen-Rich Uranium Dioxide at High Temperatures ». *Journal of the American Ceramic Society* 52, no 1 (1969), 1-. doi:10.1111/j.1151-2916.1968.tb11863.x-i1.
- Nye, J. F. « Some Geometrical Relations in Dislocated Crystals ». *Acta Metallurgica* 1, no 2 (1953), 153-62. doi:10.1016/0001-6160(53)90054-6.

- Pacull, J. « Modèle numérique micro-mécanique d'agrégat polycristallin pour le comportement des combustibles oxydes ». Ecole Nationale Supérieure d'Arts et Métiers, 2011.
- Parfitt, D. C., C. L. Bishop, M. R. Wenman et R. W. Grimes. « Strain Fields and Line Energies of Dislocations in Uranium Dioxide ». *Journal of Physics-Condensed Matter* 22, no 17 (2010), 175004. doi:10.1088/0953-8984/22/17/175004.
- Pennock, G. M. et M. R. Drury. « Low-Angle Subgrain Misorientations in Deformed NaCl ». *Journal of Microscopy-Oxford* 217 (2005), 130-37. doi:10.1111/j.1365-2818.2005.01410.x.
- Petch, N. J. « The Cleavage Strength of Polycrystals ». *Journal of the Iron and Steel Institute* 174, no 1 (1953), 25-28.
- Philibert, J. « Creep and diffusion ». *Solid State Ionics* 12 (1984), 321-36. doi:10.1016/0167-2738(84)90161-9.
- Philips, W.L. « Deformation and Fracture Processes in Calcium Fluoride Single Crystals ». *Journal of the American Ceramic Society* 44, no 10 (1961), 499-506. doi:10.1111/j.1151-2916.1961.tb13713.x.
- Poirier, J. P. « Reply to Diffusion-controlled dislocation creep: A defense ». *Acta Metallurgica* 27, no 3 (1979), 401-3. doi:10.1016/0001-6160(79)90032-4.
- Poirier, J. P. « Is power-law creep diffusion-controlled? » *Acta Metallurgica* 26, no 4 (1978), 629-37. doi:10.1016/0001-6160(78)90115-3.
- Poirier, J.P. *Plasticité à haute température des solides cristallins*. Ed. Eyrolles, 1976.
- Portelette, L., J., Amodeo, R. Madec, J., Soulacroix, T., Helfer, B., Michel, "Crystal viscoplastic modeling of UO₂ single crystal", *Journal of Nuclear Materials* 510 (2018) 635-643. doi:10.1016/j.jnucmat.2018.06.035.
- Poteat, L.E. et C.S. Yust. « Grain boundary reactions during deformation, in "Ceramic Microstructures », 1968, 646-56.
- Puschl, W. « Reactions Between Glide Dislocations and Forest Dislocations in Anisotropic Bcc Metals ». *Physica Status Solidi A-Applied Research* 90, no 1 (1985), 181-89. doi:10.1002/pssa.2210900117.
- Queyreau, S., G. Monnet et B. Devincre. « Slip systems interactions in α -iron determined by dislocation dynamics simulations ». *International Journal of Plasticity* 25, no 2 (2009), 361-77. doi:10.1016/j.ijplas.2007.12.009.
- Radford, Kenneth C. et G. R. Terwilliger. « Compressive Deformation of Polycrystalline UO₂ ». *Journal of the American Ceramic Society* 58, no 7-8 (1975), 274-78. doi:10.1111/j.1151-2916.1975.tb11474.x.
- Rapperport, E. J. et A. M. Huntress. « Deformation Modes of Single Crystal Uranium Dioxide from 700°C to 1900°C », 1960.

- Rauch, E. F. « The Relation between Forest Dislocations and Stress in BCC Metals ». *Key Engineering Materials*, 1994. doi:10.4028/www.scientific.net/KEM.97-98.371.
- Rice, R. W. et P. F. Becher. « Effect of Surface Finishing on Strength of Ceramics ». *American Ceramic Society Bulletin* 50, no 4 (1971), 374-.
- Saada, G. « Sur le durcissement dû à la recombinaison des dislocations ». *Acta Metallurgica* 8, no 12 (1960), 841-47. doi:10.1016/0001-6160(60)90150-4.
- Salvo, M. « Etude expérimentale et modélisation du comportement mécanique du combustible UO₂ en compression à haute température et forte vitesse de sollicitation ». Aix-Marseille Université, 2014.
- Sauter, F. « Comportement viscoplastique du dioxyde d'uranium à haute température ». Vandoeuvre-les-Nancy, INPL, 2001. <http://www.theses.fr/2001INPL009N>.
- Sauter, F. et S. Leclercq. « Modeling of the Non-Monotonous Viscoplastic Behavior of Uranium Dioxide ». *Journal of Nuclear Materials* 322, no 1 (2003), 1-14. doi:10.1016/S0022-3115(03)00276-9.
- Sawbridge, P. T. et E. C. Sykes. « Electrostatic charges on dislocations in uranium dioxide ». *Journal of Nuclear Materials* 35, no 1 (1970), 122-25. doi:10.1016/0022-3115(70)90037-1.
- Sawbridge, P.T. et E.C. Sykes. « Dislocation Glide in UO₂ Single Crystals at 1600°K ». *Philosophical Magazine* 24 (1971), 33-53.
- Schmid, E. et W. Boas. "Kristallplastizität", Springer Verlag (1935)
- Schwartz, J. « Approche non locale en plasticité cristalline : application à l'étude du comportement mécanique de l'acier AISI 316LN en fatigue oligocyclique ». Ecole Centrale des Arts et Manufactures, Ecole Centrale Paris, 2011.
- Scott, R., A. R. Hall et J. Williams. « The plastic deformation of uranium oxides above 800° C ». *Journal of Nuclear Materials* 1, no 1 (1959), 39-48. doi:10.1016/0022-3115(59)90009-1.
- Sellars, C. M. et W. J. McTegart. « On the mechanism of hot deformation ». *Acta Metallurgica* 14, no 9 (1966), 1136-38. doi:10.1016/0001-6160(66)90207-0.
- Seltzer, M. S., A. H. Clauer et B. A. Wilcox. « The influence of stoichiometry on compression creep of uranium dioxide single crystals ». *Journal of Nuclear Materials* 44, no 1 (1972), 43-56. doi:10.1016/0022-3115(72)90127-4.
- Seltzer, M. S., A. H. Clauer et B. A. Wilcox. « The stress dependence for high temperature creep of polycrystalline uranium dioxide ». *Journal of Nuclear Materials* 34, no 3 (1970), 351-53. doi:10.1016/0022-3115(70)90206-0.
- Seltzer, M. S., J. S. Perrin, A. H. Clauer et B. A. Wilcox. « Review of Creep Behavior of Ceramic Nuclear Fuels ». *Reactor Technology* 14, no 2 (1971), 99-.

- Sherby, O. D. et J. Weertman. « Diffusion-controlled dislocation creep: a defense ». *Acta Metallurgica* 27, no 3 (1979), 387-400. doi:10.1016/0001-6160(79)90031-2.
- Shin, C. S., M. C. Fivel, D. Rodney, R. Phillips, V. B. Shenoy et L. Dupuy. « Formation and Strength of Dislocation Junctions in FCC Metals : A Study by Dislocation Dynamics and Atomistic Simulations ». *Le Journal de Physique IV* 11, no PR5 (2001), Pr5-19-Pr5-26. doi:10.1051/jp4:2001503.
- Skelton, R. et A. M. Walker. « Peierls-Nabarro Modeling of Dislocations in UO₂ ». *Journal of Nuclear Materials* 495 (2017), 202-10. doi:10.1016/j.jnucmat.2017.08.024.
- Soulacroix, J. « Approche micromécanique du comportement du combustible dioxyde d'uranium ». Ecole Nationale Supérieure d'Arts et Métiers, 2014.
- Soulacroix, J., B. Michel, J. M. Gatt, R. Kubler et L. Barrallier. « An aging elasto-viscoplastic model for ceramics ». *International Journal of Plasticity* 62 (2014), 121-37. doi:10.1016/j.ijplas.2014.07.006.
- Soulié, A., J. P. Crocombette, A. Kraych, F. Garrido, G. Sattonnay et E. Clouet. « Atomistically-informed thermal glide model for edge dislocations in uranium dioxide ». *Acta Materialia* 150 (2018), 248-61. doi:10.1016/j.actamat.2018.03.024.
- Staiger, M. P., I. Kolbeinsson, J. Newman, T. Woodfield et T. Sato. « Orientation imaging microscopy of polycrystalline sodium chloride ». *Materials Characterization* 61, no 4 (2010), 413-19. doi:10.1016/j.matchar.2010.01.007.
- Swanson, H. E. *Standard x-ray diffraction powder patterns*. [Washington, DC] :, 1953. <http://hdl.handle.net/2027/mdp.39015077578667>.
- Tang, M., B. Devincre et L. P. Kubin. « Simulation and Modelling of Forest Hardening in Body Centre Cubic Crystals at Low Temperature ». *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering* 7, no 5 (1999), 893. doi:10.1088/0965-0393/7/5/319.
- Tang, M., M. Fivel et L. P. Kubin. « From Forest Hardening to Strain Hardening in Body Centered Cubic Single Crystals: Simulation and Modeling ». *Materials Science and Engineering A-Structural Materials Properties Microstructure and Processing* 309 (2001), 256-60. doi:10.1016/S0921-5093(00)01764-0.
- Taylor, G. I. « The Mechanism of Plastic Deformation of Crystals. Part I. Theoretical ». *Proceedings of the Royal Society of London Series A* 145 (1934), 362-87. doi:10.1098/rspa.1934.0106.
- Teodosiu, C., J.L. Raphanel et L. Tabourot. « Finite element simulation of the large elastoplastic deformation, in Large Plastic Deformation, édité par Teodosiu, Raphanel et Sidoroff, Rotterdam, A.A. Balkema », 1991.
- Tsitsiris, E. et J.M. Gatt. « Modélisation du fluage par diffusion dans une céramique poreuse ». Besançon, 2011.

- Valcke, S. L. A., G. M. Pennock, M. R. Drury et J. H. P. De Bresser. « Electron Backscattered Diffraction as a Tool to Quantify Subgrains in Deformed Calcite ». *Journal of Microscopy-Oxford* 224 (2006), 264-76. doi:10.1111/j.1365-2818.2006.01698.x.
- Verdier, M., M. Fivel et I. Groma. « Mesoscopic Scale Simulation of Dislocation Dynamics in Fcc Metals: Principles and Applications ». *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering* 6, no 6 (1998), 755. doi:10.1088/0965-0393/6/6/007.
- Wickham, L. K., K. W. Schwarz et J. S. Stölken. « Rules for Forest Interactions between Dislocations ». *Physical Review Letters* 83, no 22 (1999), 4574-77. doi:10.1103/PhysRevLett.83.4574.
- Willis, B. T. M. « Neutron Diffraction Studies of the Actinide Oxides I. Uranium Dioxide and Thorium Dioxide at Room Temperature ». *Proc. R. Soc. Lond. A* 274, no 1356 (1963), 122-33. doi:10.1098/rspa.1963.0117.
- Wolfe, R.A. et S.F. Kaufman. « Mechanical Properties of Oxide Fuels ». Technical Report. Bettis Atomic Power Laboratory, Pittsburgh, PA., 1967.
- Yust, C. S. et C. J. McHargue. « Dislocation substructures in deformed uranium dioxide single crystals ». *Journal of Nuclear Materials* 31, no 2 (1969), 121-37. doi:10.1016/0022-3115(69)90187-1.

Analyse des mécanismes de glissement des dislocations dans l'UO₂ à l'aide de la modélisation multi-échelles comparée à l'expérience

Dans le cadre de l'étude des éléments combustibles des réacteurs à eau pressurisée, cette thèse s'inscrit dans la compréhension et la modélisation du comportement viscoplastique du dioxyde d'uranium (UO₂) à l'échelle du polycristal. Lors de fonctionnement de type incidentel du réacteur, le combustible subit une forte élévation de la température avec un gradient thermique entre le centre et la périphérie de la pastille engendrant des déformations viscoplastiques contrôlées par des mécanismes liés aux mouvements des dislocations. Dans un premier temps, un modèle de plasticité cristalline a été développé de manière à décrire l'anisotropie viscoplastique du matériau en fonction de la température et de la vitesse de sollicitation. Des simulations par éléments finis (EF) sur monocristaux ont permis d'identifier que les trois modes de glissement généralement observés dans l'UO₂ ont une importance capitale pour décrire le comportement anisotrope du matériau. Dans un second temps, les coefficients de la matrice d'interactions entre dislocations ont été déterminés spécifiquement pour l'UO₂ afin d'améliorer la modélisation des polycristaux. En effet, en calculant par EF les dislocations géométriquement nécessaires (GNDs), qui sont responsables d'une forte augmentation de la densité de dislocations stockées dans les polycristaux, les interactions entre dislocations permettent de simuler l'effet de taille de grain et l'écrouissage des pastilles. Finalement, le modèle, adapté pour les polycristaux, a été validé par comparaison avec les essais expérimentaux sur pastille et par comparaison du comportement intragranulaire simulé avec des mesures EBSD. Grâce à cette dernière comparaison, il est possible de remonter indirectement aux hétérogénéités de déformation dans les grains.

Analysis of dislocation gliding mechanisms in UO₂ thanks to multi-scale modelling compared to the experience

This thesis is part of the study of fuel elements of pressurized water reactors and, more specifically, focus on the understanding and modelling of the viscoplastic behavior of uranium dioxide (UO₂) at polycrystalline scale. During the incidental operation of the reactor, the fuel undergoes a strong increase of temperature and thermal gradient between the center and the periphery of the pellet leading to viscoplastic strains due to dislocation movement mechanisms. First, a crystal plasticity model was developed in order to describe the viscoplastic anisotropy of the material considering the temperature and the loading rate. Finite element (FE) simulations on single crystals enabled to highlight that the three slip modes generally observed in UO₂ are crucial to describe the anisotropic behavior of the material. Secondly, coefficients of the interaction matrix have been identified specifically for UO₂ in order to improve the polycrystal modelling. Indeed, by calculating geometrically necessary dislocations (GNDs), which are responsible of the great increase of the stored dislocation density in polycrystals, the interactions between dislocations enable to simulate de grain size sensitivity and hardening of the fuel pellet. Finally, the model adapted for polycrystals, have been validated by comparing FE simulations with pellet compression tests and by comparing the simulated intra-granular behavior with EBSD measurements. Thanks to the latter comparison, it is possible to indirectly compare the strain heterogeneities in the grains.