



HAL
open science

Application de la mécanique des Champs de Dislocations au comportement viscoplastique du polycristal d'UO₂

Hakima Bouizem, Etienne Castellier, Vincent Taupin, Frédéric Lebon,
Jean-Marie Gatt

► To cite this version:

Hakima Bouizem, Etienne Castellier, Vincent Taupin, Frédéric Lebon, Jean-Marie Gatt. Application de la mécanique des Champs de Dislocations au comportement viscoplastique du polycristal d'UO₂. CFM 2022 - Congrès Français de Mécanique, Association Française de Mécanique, Aug 2022, Nantes, France. hal-03888612

HAL Id: hal-03888612

<https://hal.science/hal-03888612>

Submitted on 7 Dec 2022

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

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

Application de la Mécanique des Champs de Dislocations au comportement viscoplastique du polycristal d' UO_2

H. BOUIZEM^a, É. CASTELIER^a, V. TAUPIN^b, F. LEBON^c, J.-M. GATT^a

a. CEA, DES, IRESNE, DEC, Cadarache F-13108 Saint-Paul-Lez-Durance, France.

hakima.bouizem@cea.fr, etienne.castelier@cea.fr, jean-marie.gatt@cea.fr

b. Université de Lorraine, CNRS, Arts et Métiers, LEM3, 57070 Metz, France.

taupin5@univ-lorraine.fr

c. Aix-Marseille Université, CNRS, Centrale Marseille, LMA, France. lebon@lma.cnrs-mrs.fr

Résumé :

À haute température, les déformations viscoplastiques de l' UO_2 polycristallin sont gouvernées par le mouvement des dislocations. À cette échelle, des courbures dans le réseau cristallin ont été observées, et sont associées à la présence de Dislocations Géométriquement Nécessaires (GNDs). Une approche basée sur la théorie de la Mécanique des Champs de Dislocations, qui modélise le glissement des GNDs, a été développée pour rendre compte des effets d'échelle associés à la présence de ces GNDs. Le modèle proposé est utilisé pour simuler un essai de compression à vitesse imposée d'un polycristal d' UO_2 , au cours duquel on observe l'accumulation de GNDs sur les joints de grains, leur glissement dans les grains et la formation de sous grains. Les résultats du modèle montrent, qualitativement, un bon accord avec la sous-structuration de dislocations observée expérimentalement.

Abstract :

At high-temperature, viscoplastic behaviour of polycrystalline uranium dioxide (UO_2) is governed by the dislocation flow. At this scale, curvatures in the crystal lattice, associated to the presence of Geometrically Necessary Dislocations (GNDs), have been observed. Here, we develop an approach based on the Field Dislocation Mechanics theory, which models the Geometrically Necessary Dislocations (GNDs) glide, allowing us to consider the size effects associated to GNDs. The proposed model is used to simulate an imposed speed compression test of a polycrystal of UO_2 . This test shows : accumulation of GNDs at the grain boundaries, glide within the grains and the formation of sub-grains. Results predicted by the model demonstrate, qualitatively, a good agreement with the experimentally observed dislocations substructure in deformed UO_2 .

Mots clés : Viscoplasticité, Dislocations Géométriquement Nécessaires (GNDs), Transformées de Fourier Rapide (FFT), Polycristal.

1 Introduction

Le dioxyde d'uranium (UO_2) est utilisé comme combustible nucléaire, sous forme de pastilles, dans les Réacteurs nucléaires à Eau Pressurisée (REP). Lors de transitoires de puissance, le combustible subit une forte élévation de température, d'environ 1900°C au centre des pastilles, engendrant des déformations viscoplastiques contrôlées par des mouvements de dislocations.

Des examens à l'échelle microscopique [3], sur des pastilles déformées, ont mis en évidence la formation de sous-grains, caractérisés par une faible rotation du réseau cristallin. Cette désorientation du réseau est attribuée aux Dislocations Géométriquement Nécessaires (en anglais : "Geometrically Necessary Dislocations" ou GNDs) [10, 7], qui sont des dislocations en excès dans le matériau, et qui se manifestent par une distorsion du réseau cristallin à l'échelle du polycristal.

D'autres dislocations existent : les Dislocations Statistiquement Stockées (en anglais : "Statistically Stored Dislocations" ou SSDs), qui ne participent pas à la courbure du réseau cristallin, mais contribuent cependant à l'écoulement plastique. Le présent travail traite de la modélisation du comportement viscoplastique du polycristal d' UO_2 , en modélisant l'écoulement plastique des deux populations de dislocations : les SSDs et les GNDs.

Cette modélisation se fait dans le cadre de la Mécanique des Champs de dislocation (en anglais : "Field Dislocations Mechanics" ou FDM), qui introduit le tenseur de Nye pour représenter les GNDs, et qui modélise leur écoulement à l'échelle du polycristal. Plusieurs modèles ont ainsi été proposés. Pour tenir compte de l'identité de nature entre SSDs et GNDs, nous proposons un nouveau modèle d'écoulement des GNDs, par projection du tenseur de Nye sur les systèmes de glissement. Le modèle est appliqué à un polycristal d' UO_2 : la loi de plasticité cristalline est implémentée en utilisant le logiciel MFront, tandis que l'évolution des GNDs et l'équilibre mécanique sont résolus avec le logiciel TMFFT par Transformées de Fourier Rapide ("Fast Fourier Transform" en anglais ou FFT). Les résultats de calcul seront analysés et comparés avec des résultats expérimentaux.

2 Présentation du modèle

Le modèle de plasticité cristalline utilisé dans ce travail est présenté en plusieurs étapes : glissement des dislocations, écoulement des GNDs et spécificités du modèle proposé.

2.1 Déformation plastique par glissement des dislocations

Les modèles de plasticité cristalline font évoluer les déformations plastiques par glissement des dislocations sur des systèmes de glissement. Leurs équations fondamentales sont maintenant présentées.

Notations Cet article se place dans l'hypothèse des petites déformations. Les vecteurs \mathbf{u} seront notés en gras, les tenseurs d'ordre deux $\bar{\sigma}$ et $\bar{\varepsilon}$ avec une barre en haut ou en bas suivant qu'ils sont contravariant ou covariant, les tenseurs d'ordre 4 $\bar{\bar{C}}$ avec deux barres.

Distorsion La déformation mécanique d'un matériau est caractérisé par le champ de déplacement \mathbf{u} . Pour un comportement élastoplastique, le gradient du déplacement, appelé également distorsion totale, se décompose en deux parties : élastique \underline{H}^e et plastique \underline{H}^p :

$$\underline{H} = \underline{\text{grad}}(\mathbf{u}) = \underline{H}^e + \underline{H}^p.$$

Les déformations totales, élastique et plastique sont les parties symétriques des tenseurs de distorsion correspondants :

$$\underline{\underline{\varepsilon}} = \frac{1}{2} (\underline{\underline{H}} + \underline{\underline{H}}^T).$$

Les contraintes sont engendrées par la partie élastique des déformations à travers la matrice de rigidité $\overline{\overline{C}}$:

$$\overline{\overline{\sigma}} = \overline{\overline{C}} : \underline{\underline{\varepsilon}}^e = \overline{\overline{C}} : (\underline{\underline{\varepsilon}} - \underline{\underline{H}}^p). \quad (1)$$

Le tenseur de rigidité $\overline{\overline{C}}$ peut symétriser les tenseurs : il est ainsi indifférent de l'appliquer sur les déformations ou les distorsions.

Dislocations Dans un modèle de plasticité cristalline, les distorsions plastiques $\underline{\underline{H}}^p$ sont générées par le glissement des dislocations. Une dislocation est un défaut linéaire, caractérisé par la direction de sa ligne \mathbf{t} et son vecteur de Burgers \mathbf{b} (ou vecteur de glissement). La norme $b = |\mathbf{b}|$ du vecteur de Burgers, de l'ordre de grandeur de la taille de la maille cristalline, correspond à l'amplitude de la déformation générée par la dislocation.

Une dislocation peut avoir un caractère coin ($\mathbf{t} \perp \mathbf{b}$) ou vis ($\mathbf{t} \parallel \mathbf{b}$). En réalité, les dislocations se présentent sous forme de boucles de dislocations à caractère mixte (coin et vis). Une dislocation change de signe le long d'une boucle pour permettre sa fermeture.

Effet d'échelle À l'échelle d'un polycristal, un volume élémentaire δV contient un grand nombre de dislocations différentes. La plupart, de signes opposés, s'annulent, pouvant former des dipôles.

- Les dislocations qui s'annulent entre elles sont les dislocations statistiquement stockées (SSDs),
- les dislocations qui restent, après annulation des autres, sont les dislocations géométriquement nécessaires (GNDs), ou dislocations en excès. Elles sont responsables de la courbure du réseau cristallin observée à l'échelle du polycristal.

En fait, toutes les dislocations sont les mêmes. La distinction entre SSDs et GNDs provient du volume δV utilisé pour les compter. La notion de GNDs provient donc de l'échelle à laquelle elles sont observées. Toutes les dislocations, statistiquement stockées ou géométriquement nécessaires, contribuent par leur écoulement à la formation de distorsion plastique $\underline{\underline{H}}^p$.

Glissement Dans cet article, nous ne considérons que l'écoulement des dislocations par glissement, et nous ignorons la montée, qui est pourtant un phénomène important. Les dislocations glissent dans des plans cristallins définis par une normale \mathbf{n}^s , et suivant une direction de glissement \mathbf{m}^s , parallèle au vecteur de Burgers, telles que $\mathbf{b}^s = b \mathbf{m}^s$. La combinaison d'un plan et d'une direction de glissement forme un système de glissement s , caractérisé par un tenseur d'orientation $\underline{\underline{\beta}}^s = \mathbf{m}^s \otimes \mathbf{n}^s$.

Sous l'action d'une contrainte $\overline{\overline{\sigma}}$, les dislocations glissent sur chaque système s avec une vitesse :

$$\mathbf{V}^s = V^s(\tau^s) \mathbf{m}^s \quad \text{avec} \quad \tau^s = \overline{\overline{\sigma}} : \underline{\underline{\beta}}^s, \quad (2)$$

pilotée par la contrainte de cisaillement résolue τ^s . Dans ce glissement les différents systèmes en compétition, et seuls les mieux orientés, au sens du tenseur $\underline{\underline{\beta}}^s$, participent au glissement.

Vitesse Pour des raisons de symétrie, la vitesse de glissement V^s est une fonction impaire, et pour respecter le deuxième principe de la thermodynamique, pour que la puissance dissipée soit positive, elle doit vérifier l'inégalité :

$$V^s(\tau^s) \tau^s \geq 0.$$

La fonction peut être identifiée par des tests mécaniques sur des monocristaux. Ce point sera développé plus loin, au paragraphe 3.1.

Loi d'Orowan Le glissement des dislocations induit une augmentation de la déformation plastique. Sur chaque système s , la dérivée plastique est proportionnelle à la densité de dislocations mobiles ρ^s qu'il contient, et s'exprime par la loi d'Orowan :

$$\underline{\dot{H}}^{p,s} = b \rho^s V^s \underline{\beta}^s \quad \text{c'est-à-dire} \quad \underline{\dot{H}}^p = \sum_s \underline{\dot{H}}^{p,s}. \quad (3)$$

La loi d'Orowan permet ainsi d'écrire l'évolution de la distorsion plastique $\underline{\dot{H}}^p$ induite par le glissement des dislocations.

Les modèles classiques de plasticité cristalline ne considèrent pas les GNDs, et limitent les densités de dislocations ρ^s aux seules SSDs. Ils négligent ainsi l'écoulement des GNDs à l'échelle du polycristal, qui modifie la répartition spatiale des dislocations, donc le comportement macroscopique du matériau.

2.2 Mécanique des Champs de Dislocations

La mécanique des champs de dislocations (FDM) décrit les GNDs par le tenseur de Nye, et propose de modéliser leur écoulement.

Tenseur de Nye Le tenseur de Nye a été introduit [10] pour modéliser la distorsion du réseau par les dislocations en excès, les GNDs. Ainsi, distorsions plastique et élastique, sont liées par l'équation de Kröner [6] :

$$\underline{\alpha} = -\text{rot}(\underline{H}^p) = \text{rot}(\underline{H}^e). \quad (4)$$

La théorie continue des dislocations, initiée par Kröner [6, 7], a vite compris que le tenseur de Nye était la propriété caractéristique des dislocations à l'échelle microscopique. Lors du passage aux échelles supérieures, les SSDs s'annulent, et il ne reste dans le tenseur de Nye que la contribution des GNDs.

Échelle microscopique À l'échelle microscopique, le tenseur de Nye représente continûment les dislocations. C'est une densité, qui inclue des informations sur les vecteurs de Burgers \mathbf{b} et de direction \mathbf{t} . Lorsque les dislocations se déplacent avec une vitesse \mathbf{v} , le tenseur évolue par l'équation :

$$\underline{\dot{\alpha}} = -\text{rot}(\underline{\dot{H}}^p) \quad \text{avec} \quad \underline{\dot{H}}^p = \underline{\alpha} \wedge \mathbf{v}. \quad (5)$$

Changement d'échelles La théorie continue des dislocations a récemment été modifiée, rebaptisée Mécanique des Champs de Dislocations (FDM) par Acharya et ses collaborateurs [1] pour décrire le mouvement des GNDs. Aux échelles supérieures, par prise de moyenne sur un volume élémentaire δV ,

l'équation microscopique (5) devient :

$$\langle \dot{\underline{\alpha}} \rangle = -\text{rot}(\dot{\underline{H}}^p) \quad \text{avec} \quad \dot{\underline{H}}^p = \langle \underline{\alpha} \wedge \mathbf{v} \rangle = \langle \underline{\alpha} \rangle \wedge \mathbf{V} + \underline{L}^p. \quad (6)$$

Ses différents termes doivent être expliqués :

- La prise de moyenne $\langle \underline{\alpha} \rangle$ sur le tenseur de Nye microscopique $\underline{\alpha}$ fait disparaître les SSDs : il ne reste que les GNDs.
- Par comparaison avec l'équation microscopique (5), le terme $\langle \underline{\alpha} \rangle \wedge \mathbf{V}$ représente le mouvement des GNDs, qui sont animées d'une vitesse macroscopique \mathbf{V} .
- Le terme restant \underline{L}^p représente donc l'évolution de déformation plastique due aux SSDs. Il prend ainsi la forme (3) des modèles classiques de plasticité cristalline :

$$\underline{L}^p = b \sum_s \rho_m^s V^s \underline{\beta}^s. \quad (7)$$

Dans cette écriture, les densités de SSDs des systèmes s sont notées ρ_m^s .

L'équation (6) est une équation constitutive de la FDM, c'est-à-dire qu'elle est postulée, mais pas démontrée.

Vitesse macroscopique Pour fermer son système d'équations, la FDM doit proposer un modèle pour calculer la vitesse \mathbf{V} des GNDs. Elle le fait en deux temps :

- La direction du vecteur \mathbf{V} est calculée [2] par le principe de dissipation maximale de Hill, tout en assurant que la déformation plastique reste isochore.
- La norme de la vitesse a été proposée par Richeton et al. [12] comme une moyenne pondérée des vitesses V^s des SSDs sur les systèmes de glissement.

Problème Le problème de cette approche, contenu dans l'équation constitutive (6), est de proposer une vitesse unique pour les GNDs appartenant aux différents systèmes de glissement. Ainsi, dans un même système de glissement, les SSDs et GNDs glissent à des vitesses différentes, alors que physiquement, il s'agit des mêmes dislocations.

2.3 Glissement des GNDs sur les systèmes de glissement

Pour faire en sorte que les dislocations d'un même système, qu'elles soient comptabilisées comme SSDs ou GNDs, glissent à la même vitesse, il faut pouvoir séparer les GNDs des différents systèmes.

Décomposition À partir de maintenant, pour simplifier les notations, le tenseur de Nye des GNDs, noté précédemment comme une moyenne $\langle \underline{\alpha} \rangle$, sera noté simplement $\underline{\alpha}$. Ce tenseur, qui comptabilise les GNDs comprises dans le volume élémentaire δV , peut se décomposer en plusieurs tenseurs $\underline{\alpha}^s$, associés à chaque système s :

$$\underline{\alpha} = \sum_s \underline{\alpha}^s;$$

et sur chaque système s , le tenseur de Nye associé $\underline{\alpha}^s$ peut être décomposé en deux densités de dislocations coin ρ_c^s et vis ρ_v^s :

$$\underline{\alpha}^s = b \rho_c^s \mathbf{m}^s \otimes (\mathbf{n}^s \wedge \mathbf{m}^s) + b \rho_v^s \mathbf{m}^s \otimes \mathbf{m}^s.$$

Ces densités peuvent être négatives lorsque les dislocations négatives sont en excès.

Glissement D'après l'équation (5) de la théorie continue des dislocations, ces GNDs, qui glissent avec une vitesse $\mathbf{V}_G^s = V_G^s \mathbf{m}^s$ sur le système s , font évoluer la distorsion plastique de :

$$\dot{\underline{H}}_G^{p,s} = \underline{\alpha}^s \wedge \mathbf{V}_G^s = -b \rho_c^s V_G^s \underline{\beta}^s.$$

Les dislocations vis ne contribuent par à cette distorsion, car :

$$(\mathbf{m}^s \otimes \mathbf{m}^s) \wedge \mathbf{m}^s = 0.$$

Il faut ajouter la contribution $\underline{L}^{p,s}$ des SSDs (7) à celle des GNDs, pour obtenir finalement l'évolution totale de distorsion plastique du système s :

$$\dot{\underline{H}}^{p,s} = \underline{\alpha}^s \wedge \mathbf{V}_G^s + \underline{L}^{p,s} \quad \text{avec} \quad \underline{L}^{p,s} = b \rho_m^s V^s \underline{\beta}^s, \quad (8a)$$

$$= b (|\rho_c^s| + \rho_m^s) V^s \underline{\beta}^s \quad \text{avec} \quad \mathbf{V}_G^s = -\text{sgn}(\rho_c^s) V^s. \quad (8b)$$

Cette équation amène les remarques suivantes :

- Sous sa forme (8a), elle correspond à l'équation (6) de la FDM, limitée au seul système s .
- Sa forme (8b) montre l'identité entre SSDs et GNDs : lorsqu'on oublie leurs signes, toutes glissent de manière identique avec une vitesse V^s , il n'est plus possible de les distinguer.

Écoulement L'équation de Kröner (4) permet d'établir l'équation d'évolution des GNDs du système s :

$$\dot{\underline{\alpha}}^s = -\text{rot}(\underline{\alpha}^s \wedge \mathbf{V}_G^s + \underline{L}^{p,s}). \quad (9)$$

Fressengeas [4] montre que ce type d'équation exprime, sous forme déguisée, une équation de transport des GNDs avec la vitesse \mathbf{V}_G^s . Dans cette expression, la contribution $\underline{L}^{p,s}$ des SSDs, apparaît comme une source/puits de GNDs. Les GNDs seront donc produites par l'écoulement des SSDs, dans les zones où les contraintes sont les plus importantes, comme les joints de grains d'un polycristal.

Richeton et al. [11] utilisent cette équation (9) pour l'écoulement des GNDs. Ils utilisent des équations supplémentaires à l'interface entre les grains, pour transférer les GNDs d'un grain à l'autre. Ce type de résolution est faisable avec des Éléments Finis (EF), et des éléments spéciaux à l'interface entre les grains.

Projection Nous avons opté pour un autre type de résolution : l'équilibre mécanique et l'écoulement des GNDs sont résolus par Transformées de Fourier Rapides (FFT) avec le logiciel TMFFT sur une grille régulière. Les GNDs de tous les systèmes sont regroupés dans le tenseur de Nye, calculé à chaque itération par la formule de Kröner (4) à partir du tenseur de distorsion plastique :

$$\underline{\alpha} = -\text{rot}(\underline{H}^p).$$

Pour assurer l'écoulement des GNDs avec l'équation d'écoulement (8b), ce tenseur est projeté sur les tenseurs $\mathbf{m}^s \otimes (\mathbf{n}^s \wedge \mathbf{m}^s)$, en négligeant la contribution des dislocations vis :

$$\rho_c^s = \Pi^s(\underline{\alpha}), \quad \text{avec} \quad \underline{\alpha} = b \sum_s \rho_c^s \mathbf{m}^s \otimes (\mathbf{n}^s \wedge \mathbf{m}^s). \quad (10)$$

Cette projection conduit à un système surdéterminé, résolu par moindres carrés.

3 Application à un polycristal d'UO₂

Le modèle proposée en section 2 précédente est maintenant appliqué à un polycristal d'UO₂. Il faut auparavant identifier ses paramètres pour l'UO₂, et proposer un schéma numérique pour résoudre ses équations.

3.1 Identification des paramètres de l'UO₂

Cristallographie L'UO₂ est un solide cristallin de structure fluorine, à symétrie cubique, avec un paramètre de maille $a = 5,47 \text{ \AA}$. Son tenseur d'élasticité $\overline{\overline{C}}$ est caractérisé par trois paramètres C_{11} , C_{12} et C_{44} dont les valeurs sont reportées dans le tableau 1.

Le glissement des dislocations se fait avec un vecteur de Burgers de type $\mathbf{b} = \frac{a}{2} [110]$: sa longueur est égale à $b = \frac{a}{\sqrt{2}}$ et sa direction est donnée par la famille de directions $\langle 110 \rangle$ (direction $[110]$ et symétriques). Deux familles de systèmes de glissement existent, correspondant aux deux familles de plans cristallographiques : $\{100\}$ et $\{110\}$. Avec les symétries du cristal, chaque famille comprend 6 systèmes.

C_{11} (GPa)	C_{12} (GPa)	C_{44} (GPa)	b (m)	ρ_m^s (m ⁻²)	T(K)
389.3	118.7	59.7	$3.86 \cdot 10^{-10}$	$1 \cdot 10^{12}$	1500

TABLE 1 – Paramètres du modèle pour un cristal d'UO₂.

Taux de glissement Il n'est pas possible de mesurer directement la vitesse de glissement, mais des essais sur des monocristaux, permettent de déterminer le taux de glissement, qui lui est proportionnel :

$$\dot{\gamma}^s(\tau^s) = b \rho_m^s V^s(\tau^s) \quad \text{avec} \quad \tau^s = \bar{\sigma} : \underline{\beta}^s.$$

Il faut pour cela disposer de nombreux essais sur monocristaux, pour plusieurs vitesses de sollicitation, à plusieurs températures, et dans plusieurs orientations, pour activer l'une ou l'autre famille de glissement. Des observations expérimentales [8, 14], montrent que la loi suivante, une loi puissance, est adaptée à l'UO₂ :

$$\dot{\gamma}^s = \exp\left(-\frac{T_A^s}{T}\right) \left(\frac{|\tau^s|}{a_A^s}\right)^n \text{sgn}(\tau^s). \quad (11)$$

Cette loi prend en compte également l'aspect thermique. Les constantes T_A^s et a_A^s dépendent de la famille de glissement activée. Elles ont été ajustées par moindres carrés sur des essais de la littérature [8, 13], avec des valeurs proches de celles identifiées par Seltzer et al. [14] pour l'UO₂ stoechiométrique.

Glissement des GNDs Le glissement des SSDs (7) ne nécessite pas de connaître la vitesse de glissement, mais seulement le taux de glissement. C'est justement en faisant l'hypothèse que les essais sur monocristaux ne mettent en jeu que le glissement des SSDs qu'il est possible de mesurer le taux de glissement (11).

Pour modéliser le glissement des GNDs, il faut connaître la densité ρ_m^s des SSDs. Dans ce travail, qui ne prend pas en compte l'écroûissage, cette densité est supposée constante, à une valeur de $1 \cdot 10^{12} \text{ m}^{-2}$.

Ainsi, l'évolution plastique (8b) sur le système s peut s'écrire :

$$\underline{\dot{H}}^{p,s} = \left(1 + \frac{|\rho_c^s|}{\rho_m^s}\right) \dot{\gamma}^s(\tau^s) \underline{\beta}^s \quad \text{avec} \quad \dot{\gamma}^s = \exp\left(-\frac{T_A^s}{T}\right) \left(\frac{|\tau^s|}{a_A^s}\right)^n \text{sgn}(\tau^s). \quad (12)$$

3.2 Résolution numérique

La résolution du modèle d'écoulement des dislocations est confiée au logiciel MFront, pour intégrer le comportement mécanique et au logiciel TMFFT pour résoudre l'équilibre mécanique et l'écoulement des GNDs par FFT sur une grille régulière.

Équilibre mécanique Le code de structure TMFFT cherche à résoudre l'équilibre mécanique :

$$\text{div}(\bar{\sigma}) = 0,$$

en utilisant des FFT sur une grille périodique. L'équilibre est obtenu par un dialogue avec le modèle de comportement : TMFFT propose un champ de déformations $\underline{\varepsilon}$, la loi de comportement calcule les contraintes $\bar{\sigma}$ correspondantes, TMFFT examine l'équilibre de la structure, et corrige le champ de déformations en conséquence... Ce dialogue se poursuit de manière itérative jusqu'à atteindre l'équilibre.

Comportement mécanique La loi de comportement est construite avec le logiciel MFront [5]. Elle reçoit du code de structure (TMFFT) une estimation des déformations $\underline{\varepsilon}$, et doit calculer les contraintes $\bar{\sigma}$ correspondantes. Pour prendre en compte le glissement des GNDs, elle reçoit le tenseur de Nye $\underline{\alpha}$ comme une variable externe.

Le calcul des contraintes consiste à intégrer les équations de comportement, qui regroupent la projection (10) des GNDs, l'expression (11) du taux de glissement, la loi d'élasticité (1) ainsi que l'évolution de la déformation plastique (12) :

$$\begin{aligned} \underline{\dot{H}}^p &= \sum_s \left(1 + \frac{|\rho_c^s|}{\rho_m^s}\right) \dot{\gamma}^s(\tau^s) \underline{\beta}^s \quad \text{avec} \quad \rho_c^s = \Pi^s(\underline{\alpha}), \\ \dot{\gamma}^s &= \exp\left(-\frac{T_A^s}{T}\right) \left(\frac{|\tau^s|}{a_A^s}\right)^n \text{sgn}(\tau^s) \quad \text{avec} \quad \tau^s = \bar{\sigma} : \underline{\beta}^s, \\ \bar{\sigma} &= \bar{C} : (\underline{\varepsilon} - \underline{H}^p). \end{aligned}$$

Évolution des GNDs Le code TMFFT doit également assurer l'écoulement des GNDs. Pour ce faire, il calcule le tenseur de Nye par l'équation d'incompatibilité de Kröner (4) :

$$\underline{\alpha} = -\text{rot}(\underline{H}^p),$$

qu'il transfère au modèle de comportement comme une variable externe. Le tenseur de Nye est ainsi une variable non-locale, agissant sur la structure.

3.3 Résultats

Les calculs du test de compression mécanique sur polycristal d'UO₂ sont maintenant présentés et comparés à des résultats expérimentaux.

Polycristal La microstructure étudiée est un agrégat polycristallin d'UO₂, construite par un pavage périodique de Voronoï de 20 grains. Elle est présentée en figure 1. Le diamètre moyen des grains est d'environ 9 µm. La microstructure est discrétisée sur une grille régulière de 128 × 128 × 128 voxels.

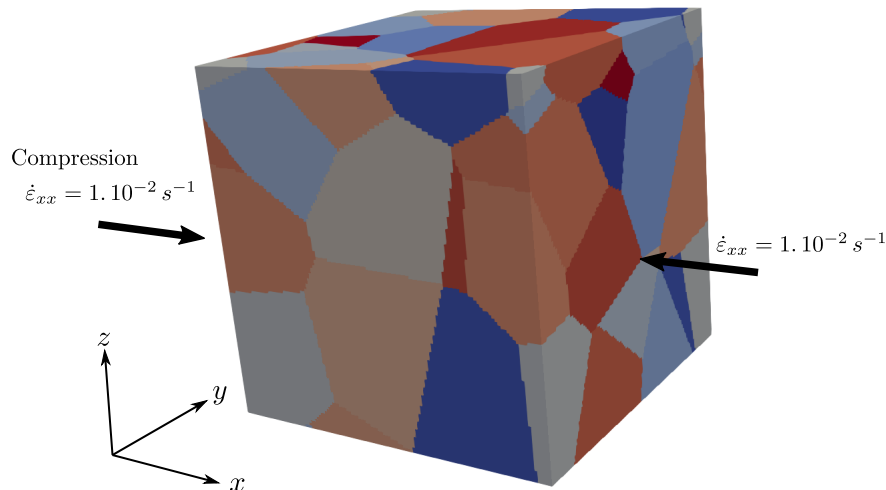


FIGURE 1 – Polycristal d'UO₂ périodique constitué de 20 grains (Voronoi 3D périodique).

Le polycristal est soumis à une compression uniaxiale, suivant l'axe x , avec des conditions périodiques. Les sollicitations correspondent à une déformation moyenne $\langle \varepsilon_{xx} \rangle$ imposée, et des contraintes moyennes nulles $\langle \sigma^{ij} \rangle$ pour les autres directions. La vitesse de déformation imposée est $\dot{\varepsilon}_{xx} = 1.10^{-2} \text{ s}^{-1}$, avec une déformation maximale de 0.1 %. Initialement, les tenseurs de distorsion plastique \underline{H}^p et de Nye $\underline{\alpha}$ sont nuls.

Plasticité La figure 2 montre les champs de déformation plastique $|\underline{H}^p|$ à 0.05% et 0.1% de la déformation macroscopique. Ces figures présentent également le champ de déplacement qui déforme le polycristal. La déformation plastique forme des bandes, qui viennent cisailer le polycristal avec une direction de 45° par rapport à la direction de compression.

La progression de la bande de cisaillement peut se faire de deux manières, suivant la forme et l'orientation des grains :

- soit elle se concentre sur les joints de grains, provoquant une rotation des grains voisins ;
- soit elle traverse le grain, de manière beaucoup plus diffuse. Le grain traversé est alors tordu par cette bande plastique.

GNDs La figure 3 représente la densité scalaire $\rho_G = |\underline{\alpha}|/b$ des GNDs, obtenues à 0.066 % et 0.1 % de la déformation macroscopique. Les GNDs apparaissent aux joints de grains, où l'incompatibilité de déformation élastique entre grains différents créent de fortes contraintes, activant le glissement des SSDs.

Les GNDs s'écoulent ensuite à travers les grains. Dans cette migration, il semble qu'elles empruntent des chemin préférentiels, qui pourraient être interprétés comme des murs de dislocations. Ce mouvement est plus facile à observer à partir des coupes 2D de la figure 4.

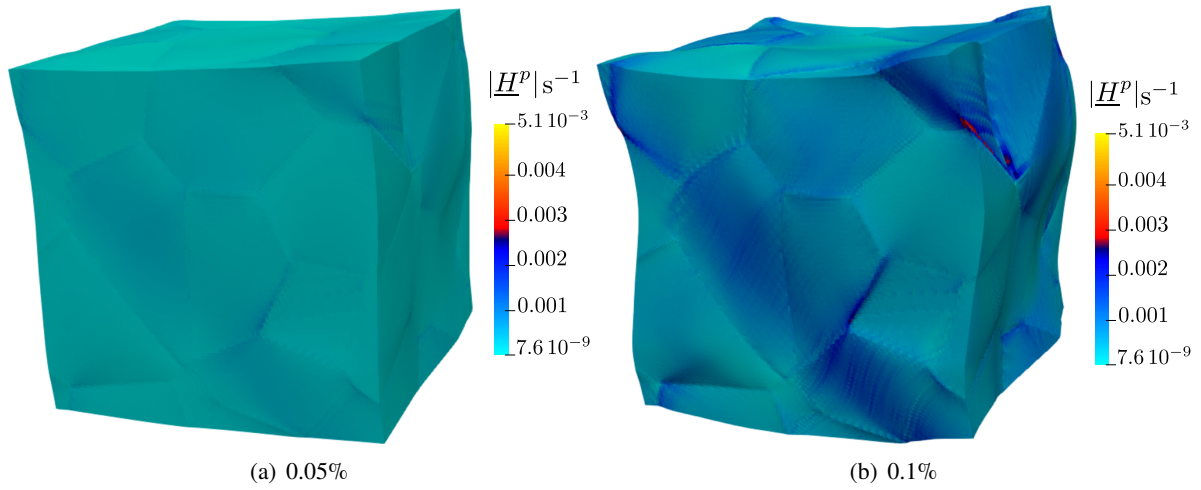


FIGURE 2 – Cartes des champs de déformations plastiques $|\underline{H}^P|$ obtenues à 0.05% et 0.1% de la déformation macroscopique.

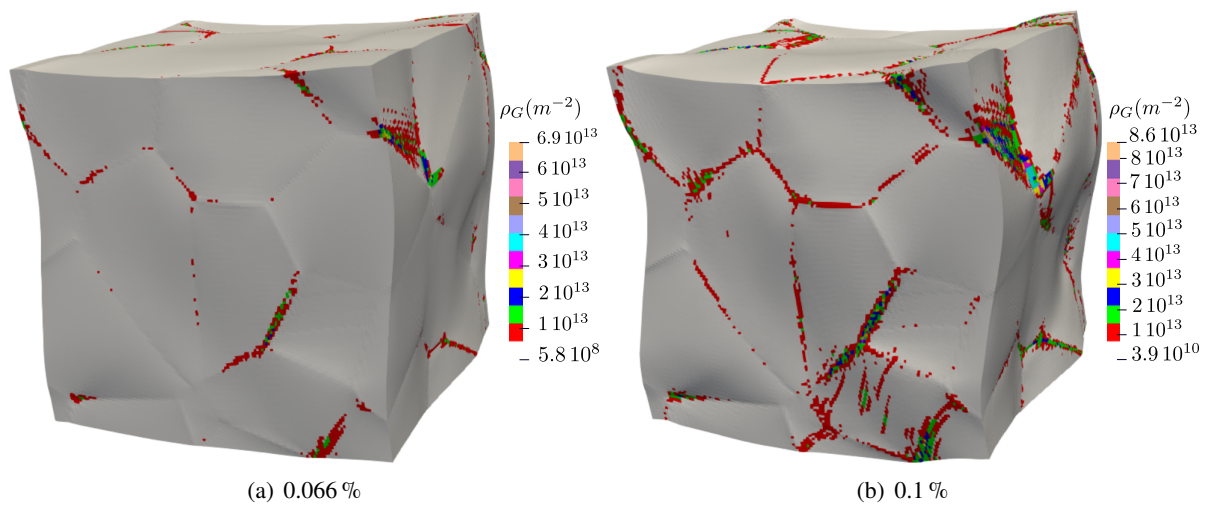


FIGURE 3 – Distribution des densités de GNDs obtenue à 0.066% et 0.1% de la déformation macroscopique.

Comparaison La figure 4 montre la distribution des densités ρ_G dans les grains après déformation dans trois coupes orthogonales aux axes respectifs x , y , et z . Ces coupes font apparaître distinctement les chemins empruntés par les GNDs, qui semblent partitionner les grains en sous structures. La densité maximale observée (en rouge sur les coupes) vaut environ $1. \cdot 10^{13} \text{ m}^{-2}$.

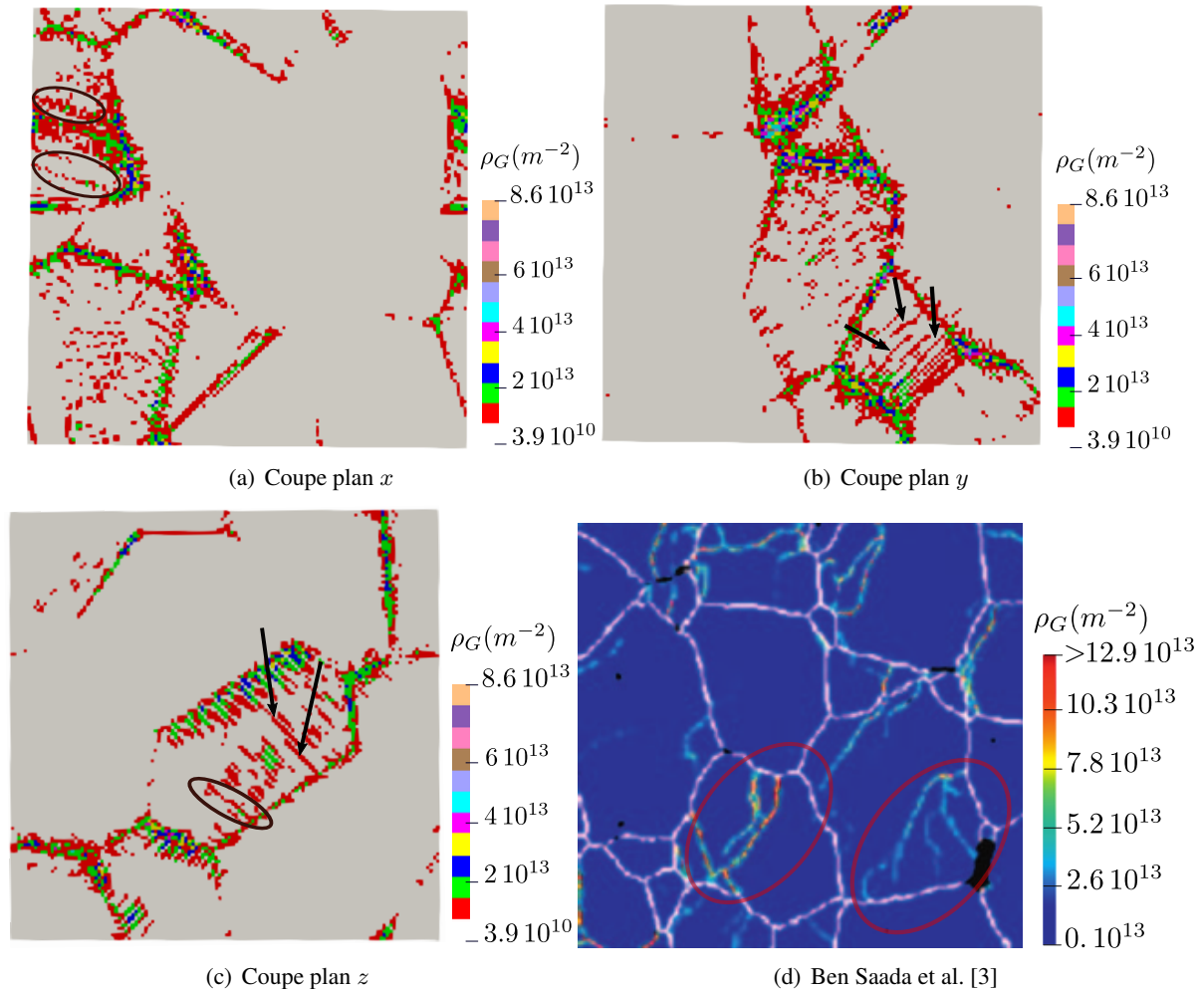


FIGURE 4 – Comparaison des coupes de distribution des densités de GNDs suivant les plans x , y , et z , à une observation expérimentale [3].

Ces coupes peuvent être comparées à un résultat expérimental de Ben Saada et al. [3], présenté en figure 4(d) : il s'agit de la distribution de GNDs après compression d'une pastille combustible à une vitesse de 10^{-4} s^{-1} , avec une déformation maximale de 8 %. Les GNDs se distribuent sur des murs qui séparent les grains en plusieurs sous grains. La densité maximale est également de l'ordre de $1. \cdot 10^{13} \text{ m}^{-2}$. Les conditions expérimentales étant différentes, la comparaison ne peut être que qualitative.

4 Conclusions et perspectives

L'article a présenté un modèle de plasticité cristalline. Pour décrire les effets d'échelle liés à la circulation de GNDs dans un polycristal d' UO_2 , il est construit dans le cadre de la FDM. Contrairement à la majorité des modèles de FDM, et pour conserver l'identité de nature des dislocations, les GNDs glissent dans chaque système comme les SSDs. Pour travailler par FFT sur une grille régulière, il a fallu décomposer le tenseur de Nye par une projection sur les différents systèmes. Appliqué à la compression d'un polycristal d' UO_2 , le modèle permet d'observer la circulation des GNDs à l'intérieur des grains sur des chemins préférentiels, ce qui est comparable qualitativement à des observations expérimentales.

Le modèle proposé a négligés des phénomènes importants liés aux dislocations, qui feront l'objet de futurs travaux : la montée des dislocations, et l'évolution des populations de dislocations (mobiles et forêt), responsable d'un écrouissage du matériau.

Références

- [1] A. Acharya. A model of crystal plasticity based on the theory of continuously distributed dislocations. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 49(4) :761–784, 2001.
- [2] A. Acharya et M. Widom. A microscopic continuum model for defect dynamics in metallic glasses. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 104 :1–11, 2017.
- [3] M. Ben Saada, N. Gey, B. Beausir, X. Iltis, H. Mansour, et N. Maloufi. Sub-boundaries induced by dislocational creep in uranium dioxide analyzed by advanced diffraction and channeling electron microscopy. *Materials Characterization*, 133 :112–121, 2017.
- [4] C. Fressengeas. *Mécanique des champs de dislocations*. Lavoisier, 2010.
- [5] T. Helfer. MFront, a code generation tool dedicated to material knowledge. <http://tfel.sourceforge.net>
- [6] E. Kröner et G. Rieder. Kontinuumstheorie der Versetzungen. *Zeitschrift für Physik*, 145(4) :424–429, 1956.
- [7] E. Kröner. Continuum theory of defects. In R. Balian, M. Kléman, et J. P. Poirier, éditeurs, *Physics of defects*, pages 215–315, Les Houches, session XXXV, 1981. North-Holland.
- [8] J.M. Lefebvre. *Contribution à l'étude de la déformation plastique d'une céramique de structure fluorite : le bioxyde d'uranium*. Thèse, Faculté des sciences de Poitiers, 1976.
- [9] T. Mura. Continuous distribution of moving dislocations. *Philosophical Magazine*, 8(89) :843–857, 1963.
- [10] J.F. Nye. Some geometrical relations in dislocated crystals. *Acta Metallurgica*, 1(2) :153–162, 1953.
- [11] T. Richeton, Lt Le, T Chauve, M Bernacki, S Berbenni, et M Montagnat. Modelling the transport of geometrically necessary dislocations on slip systems : application to single- and multi-crystals of ice. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 25(2) :025010, 2017.
- [12] T. Richeton, G. F. Wang, et C. Fressengeas. Continuity constraints at interfaces and their consequences on the work hardening of metal–matrix composites. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 59(10) :2023–2043, 2011.
- [13] P. T. Sawbridge et E. C. Sykes. Dislocation glide in UO_2 single crystals at 1600°K. *The Philosophical Magazine : A Journal of Theoretical Experimental and Applied Physics*, 24(187) :33–53, 1971.
- [14] M. S. Seltzer, A. H. Clauer, et B. A. Wilcox. The influence of stoichiometry on compression creep of polycrystalline UO_{2+x} . *Journal of Nuclear Materials*, 44 :331–336, 1972.