

DE LA RECHERCHE À L'INDUSTRIE

cea den



## Ténacité des CFC irradiés : rupture ductile et effets d'échelle

Benoit Tanguy<sup>1</sup>, Jérémy Hure<sup>1</sup>, P-O Barrioz<sup>1</sup>, J-M. Scherrer<sup>1,2</sup>, S. Forest<sup>2</sup>, J. Besson<sup>2</sup>

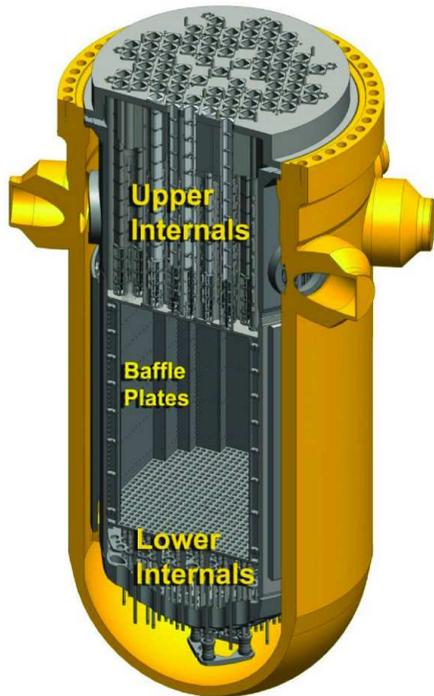
<sup>1</sup>CEA Saclay, Université Paris-Saclay, DEN, Service d'Études des Matériaux Irradiés

<sup>2</sup>MINES ParisTech, PSL Research University, MAT - Centre des matériaux

Comprendre, anticiper et prévoir le vieillissement (effets irradiation) et les dégradations potentielles des structures essentielles des réacteurs

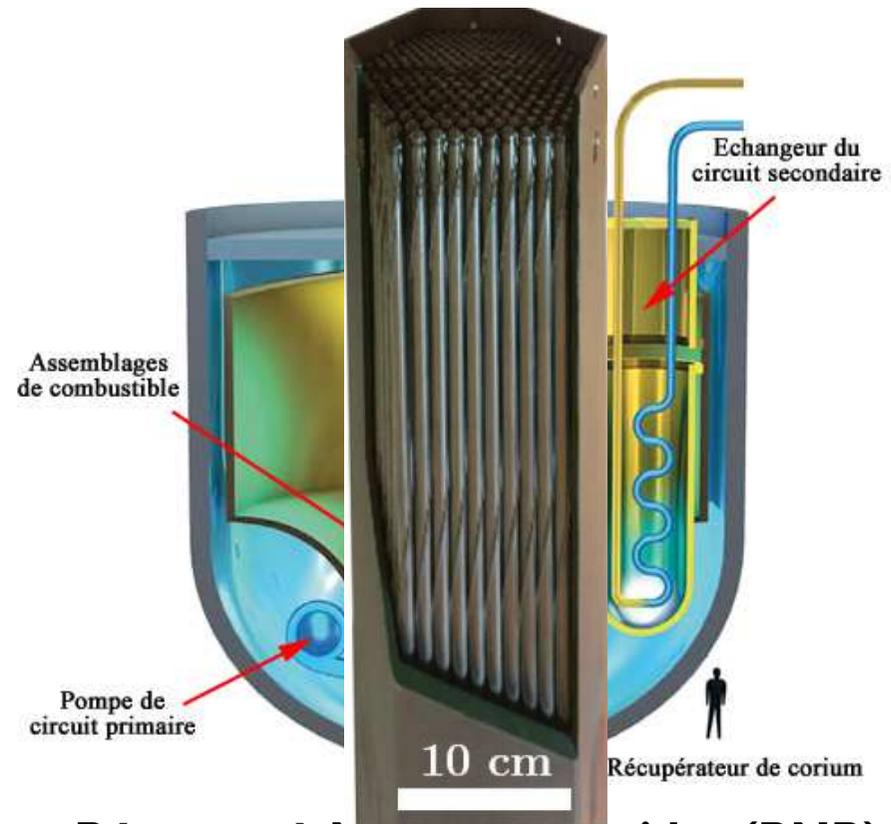
> Aciers inoxydables austénitiques

dpa : déplacement par atome



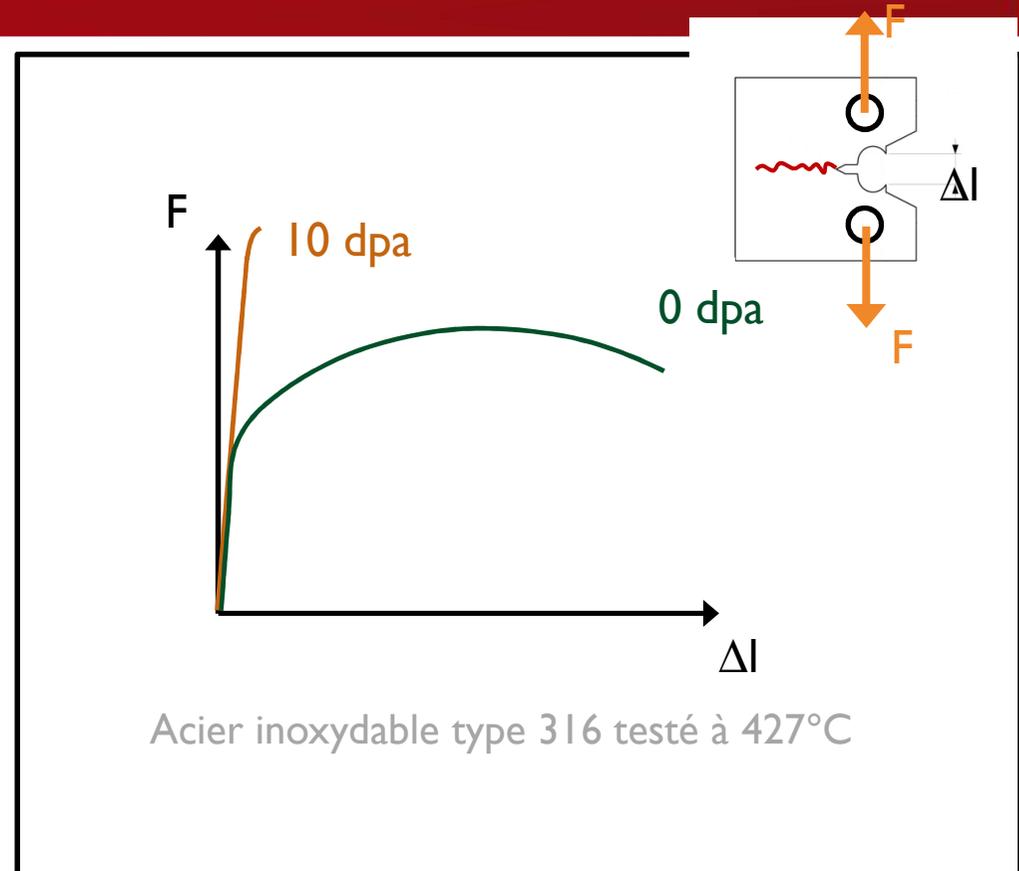
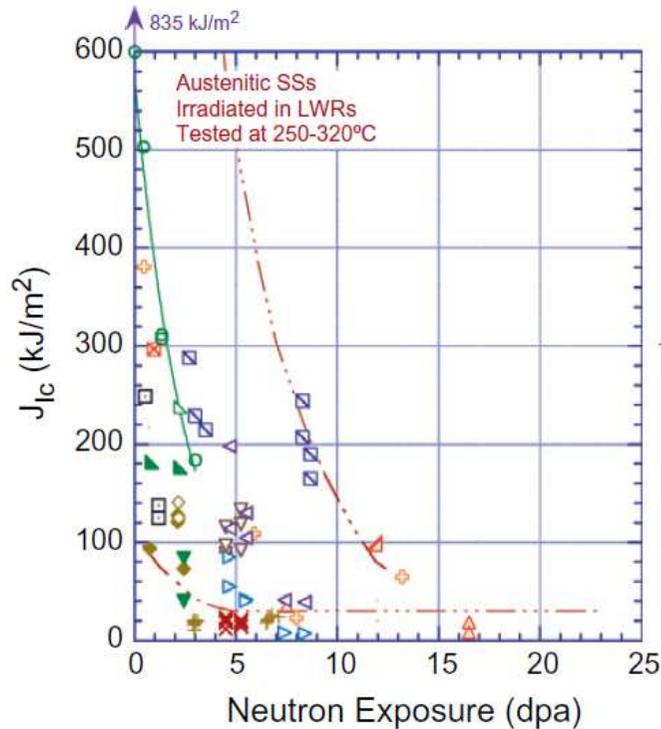
**Réacteur à Eau Pressurisée (REP)**

40 ans de service : max ~ 80 dpa



**Réacteur à Neutrons Rapides (RNR)**

Assemblage : max ~ 120 dpa

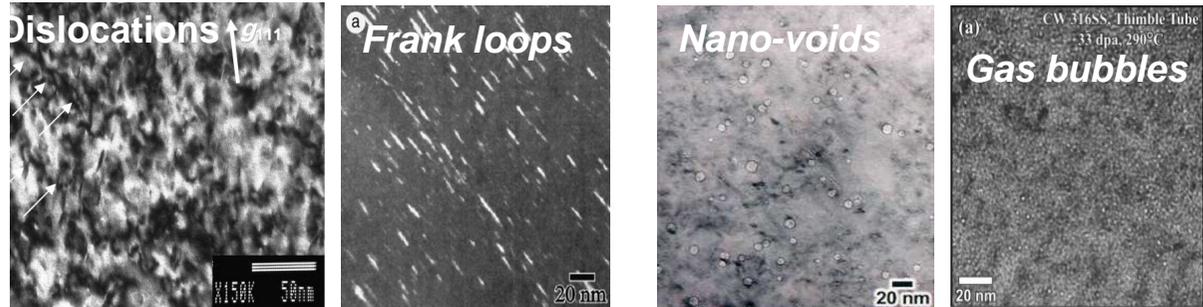
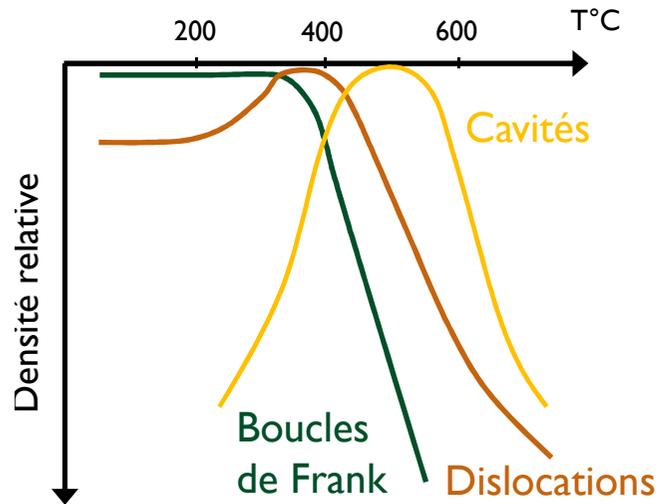


Forte **diminution de la ténacité** avec l'irradiation



Evolution du comportement en propagation : stable à instable

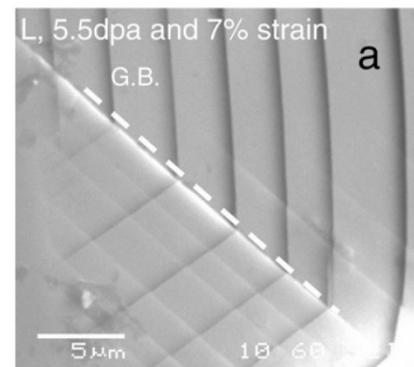
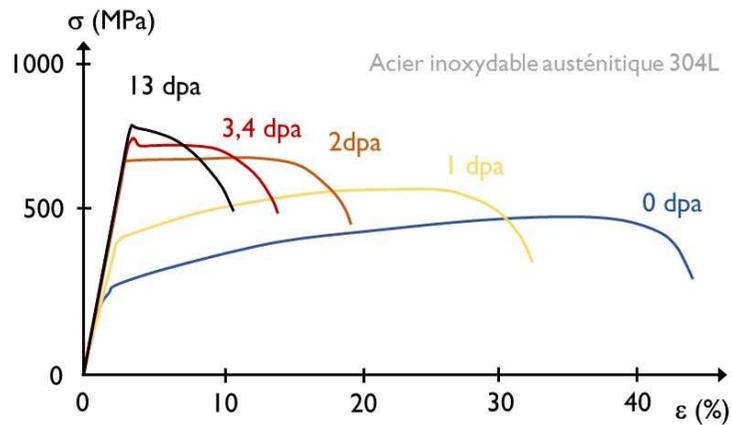
## Evolution de la microstructure



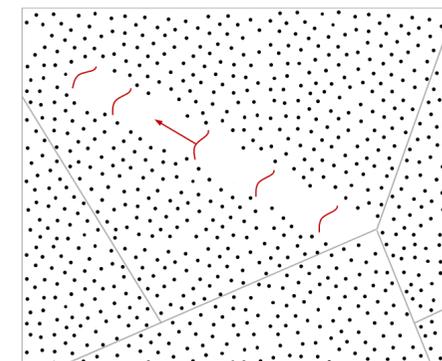
[Renault et al., 2010, Edwards et al., 2003; Pokor et al., 2004a]

*Dépend des conditions d'irradiation (température, dose, flux et spectre)*

## Evolution du comportement macroscopique et des mécanismes de plasticité



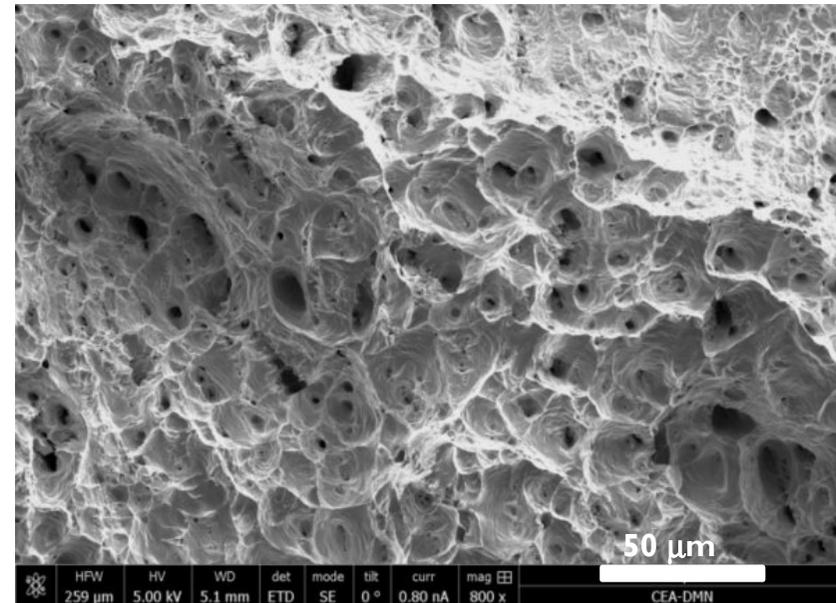
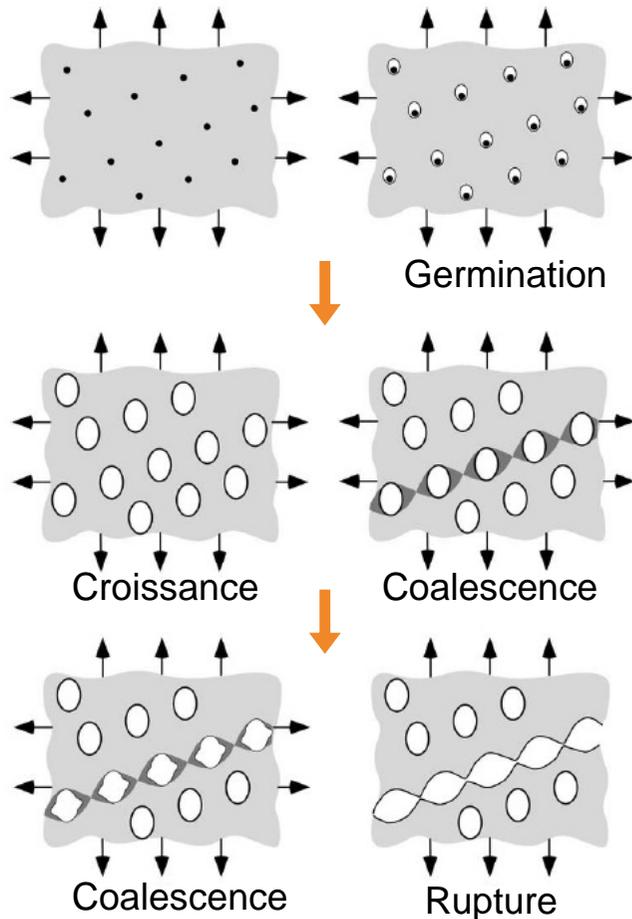
Localisation de la déformation



Canaux de dislocations

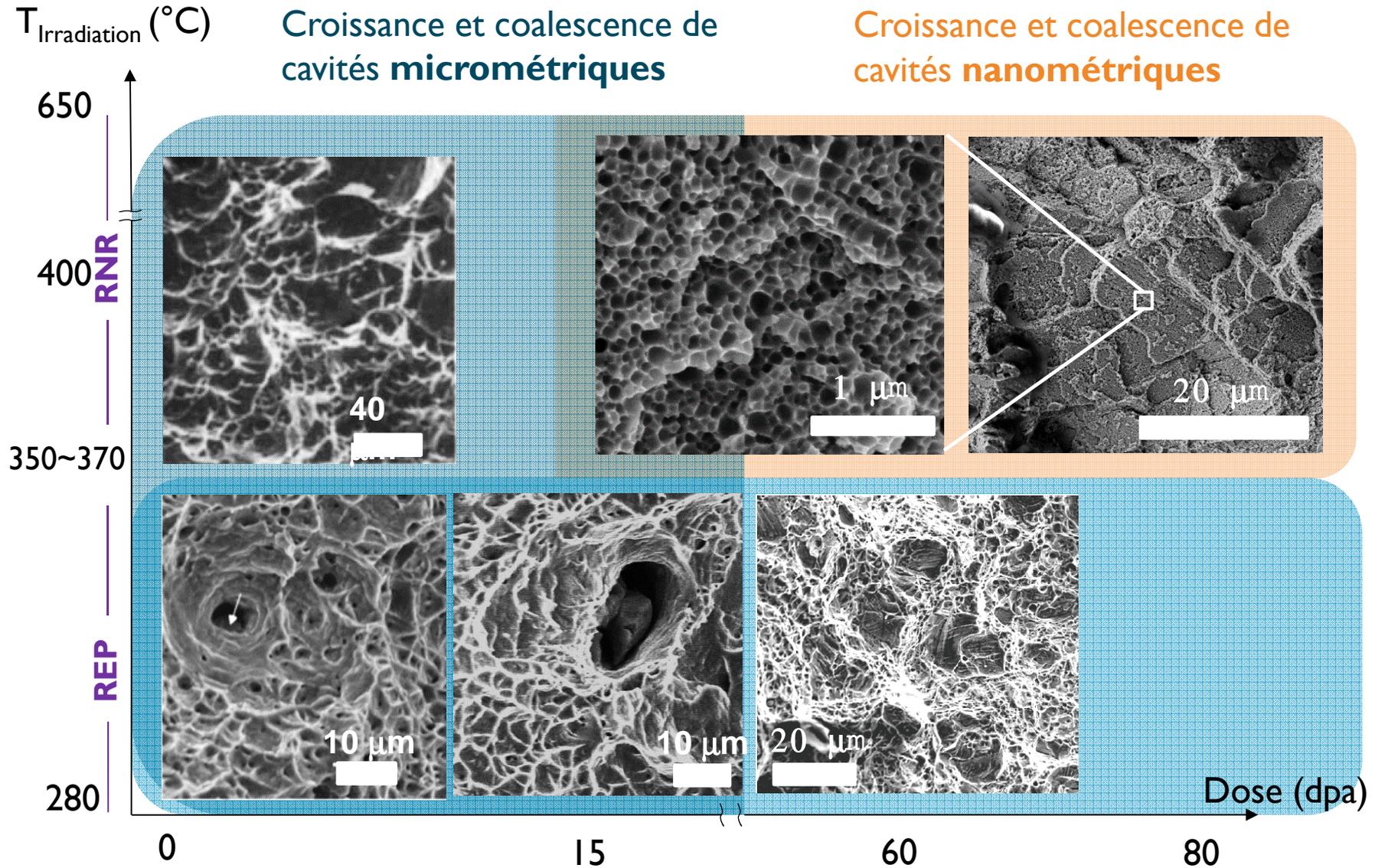
[Pokor (2003)] [Zinkle et al., 1993] [Jiao et al., 2007][Byun & Hashimoto, 2006]

## > Germination, croissance et coalescence de cavités



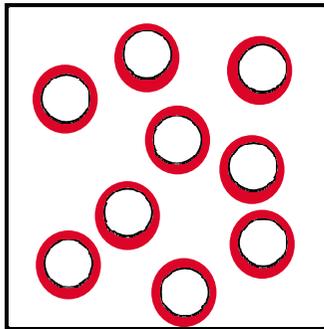
*Faciès de rupture acier inoxydable 304L (300°C)*

# Mécanismes de rupture des aciers inoxydables irradiés

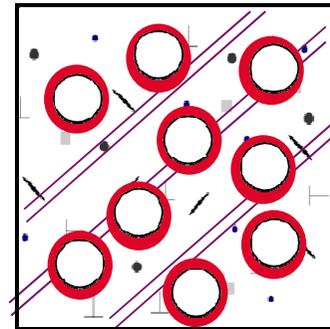


## Rupture ductile

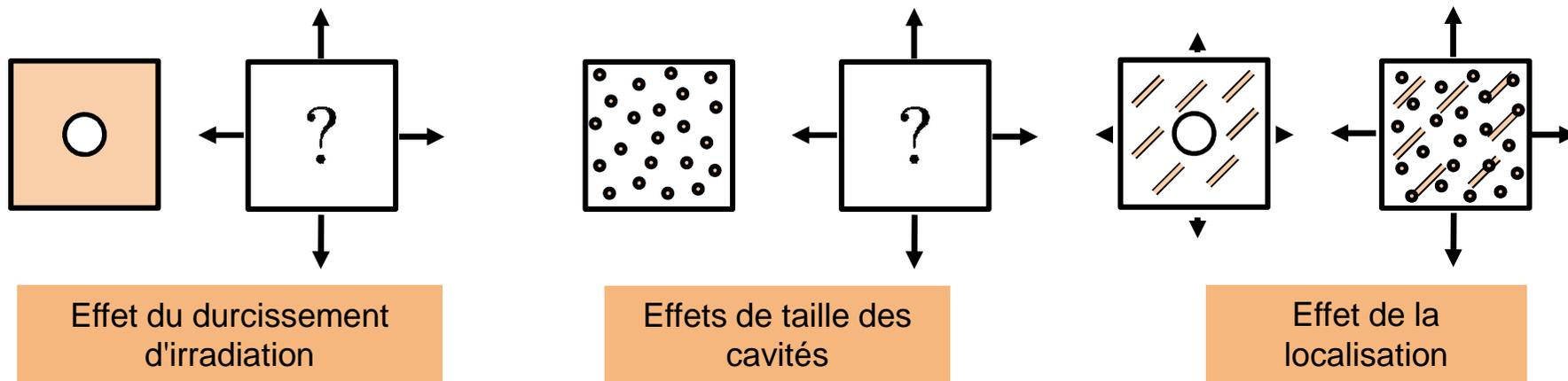
État non irradié



État irradié

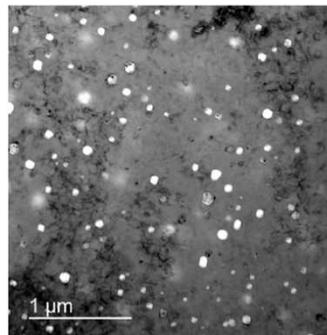
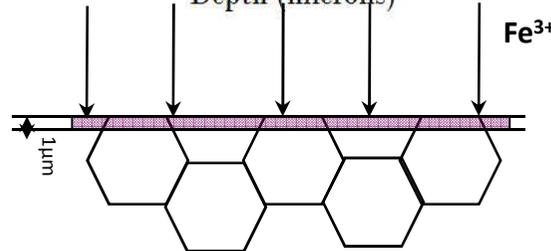
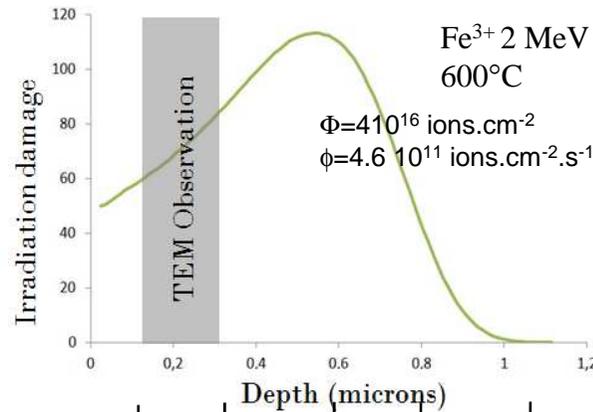
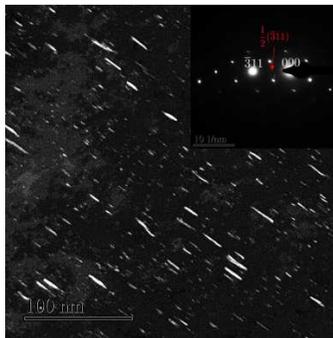
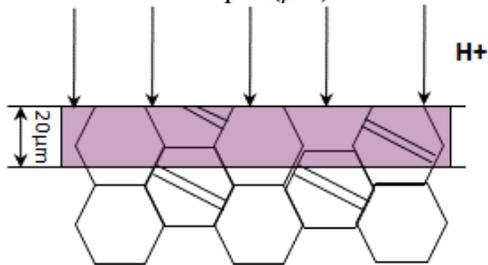
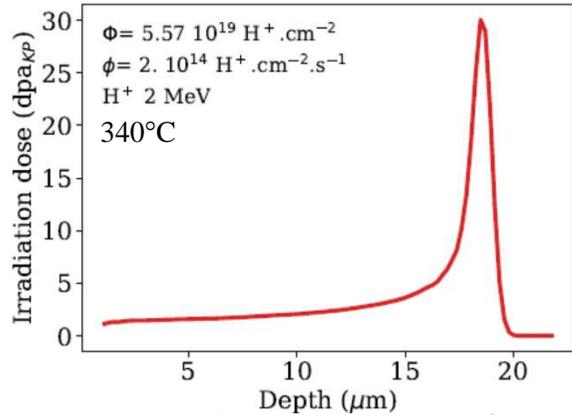


> Étude des mécanismes élémentaires (croissance & coalescence)

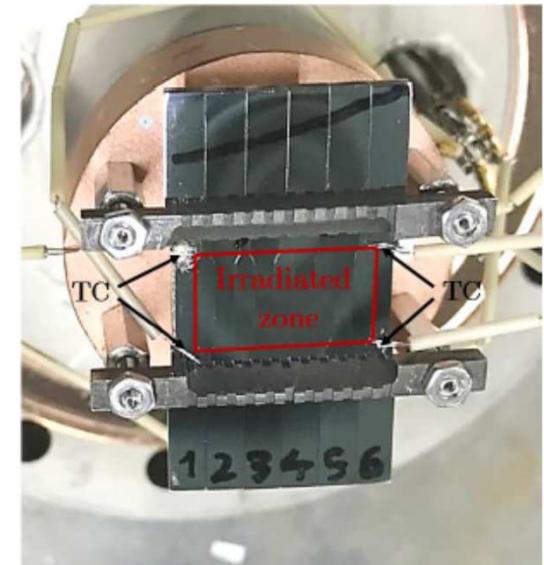


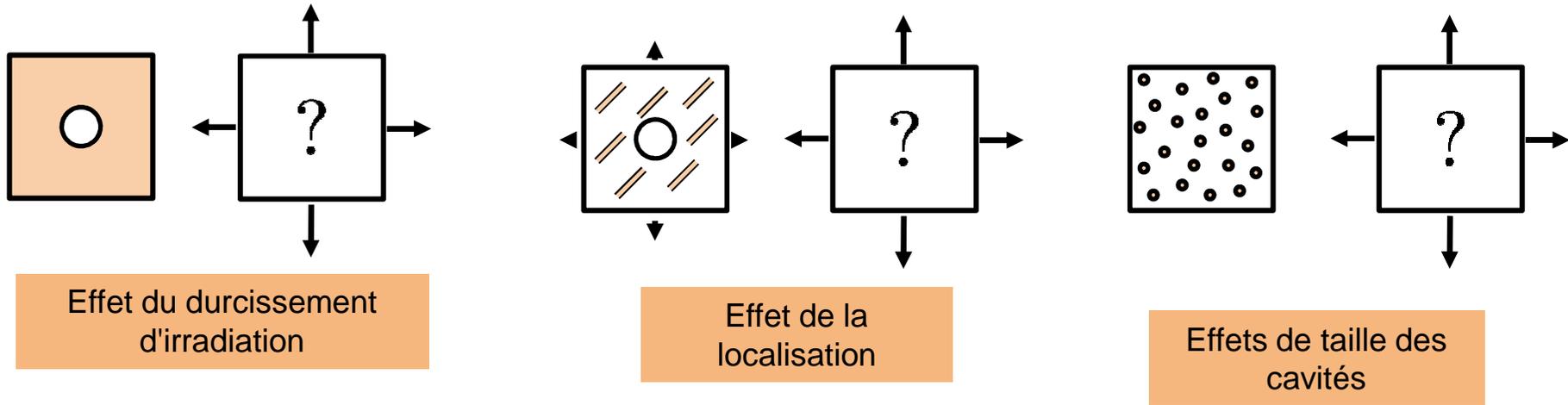
- ❑ Contexte et objectifs
  - ✓ Développement d'outils théoriques et numériques pour la prédiction de l'évolution de la ténacité des matériaux CFC irradiés
  - ✓ Comprendre le lien entre mécanismes de rupture et ténacité à partir d'un dialogue simulation / expérience aux échelles d'intérêt
  
- Cet exposé :
  - ✓ Stratégies expérimentales (focus sur les études de compréhension)
  - ✓ Modélisation (focus sur les développements à l'échelle du monocristal)
  - ✓ Perspectives

# cea den Approche expérimentale : méthodologie



Heavy Ion and Proton beam at JANNUS Saclay  
Proton Beam at Michigan MIBL

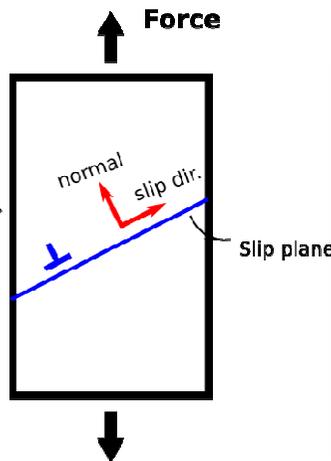




## > Crystal CFC

- ✓ Slip planes {111}
- ✓ Slip directions  $\langle \bar{1}10 \rangle$
- ✓ 12 slip systems
- ✓ Schmid tensor

$$\underline{N}^s = \underline{m}^s \otimes \underline{n}^s$$



Glissement plastique :  $\tau^s \geq \tau_c^s$

## > Lois cristallines

$$\dot{\gamma}^s = \left\langle \frac{|\tau^s| - \tau_c^s}{K} \right\rangle_+^n \text{sign}(\tau^s)$$

$$\tau_c^s = \tau_0 + \tau_\mu = \tau_0 + \mu b \sqrt{\sum_u a^{su} \rho^u}$$

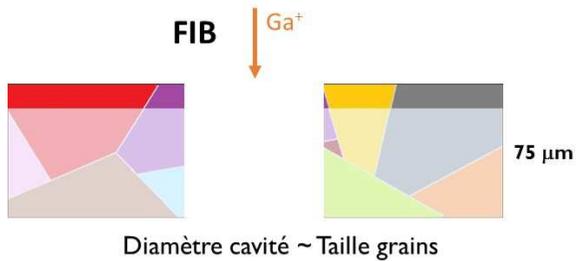
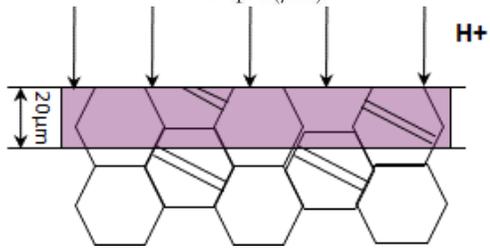
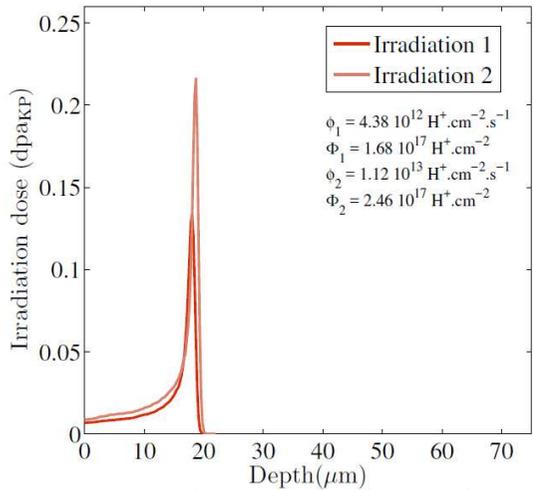
$$\dot{\rho}^s = \frac{1}{b} \left( \frac{\sum b^{su} \rho^u}{\kappa} - G_c \rho^s \right) |\dot{\gamma}^s|$$

Non irradié, irradié non localisant

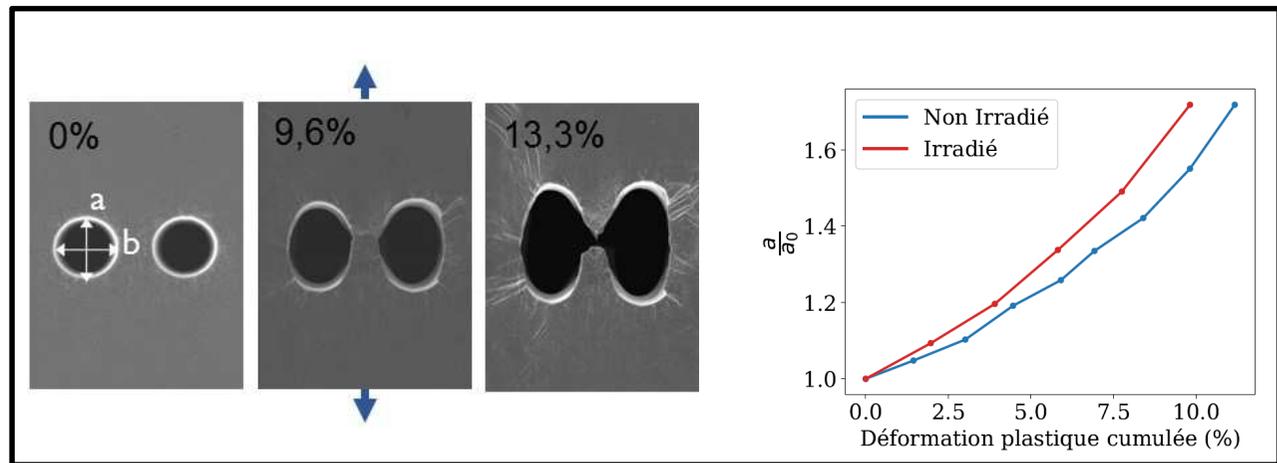
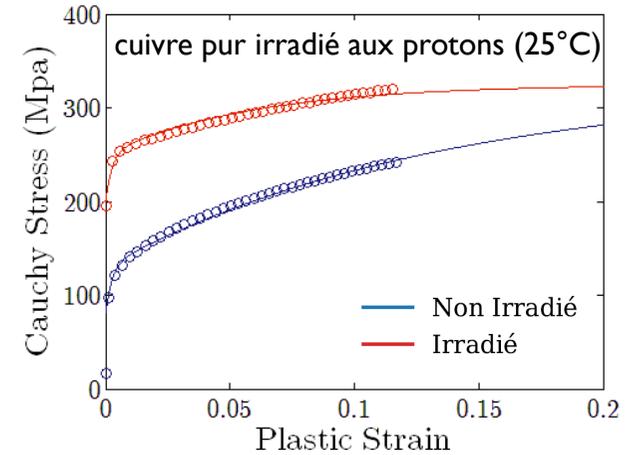
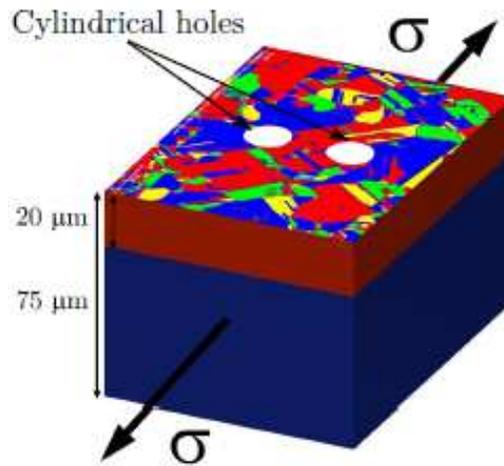
$$\dot{\gamma}^s = \left\langle \frac{|\tau^s| - \tau_c^s}{K} \right\rangle_+^n \text{sign}(\tau^s)$$

$$\tau_c^s = \tau_0 + \Delta\tau_1 \exp\left(-\frac{\gamma^s}{\gamma_0}\right)$$

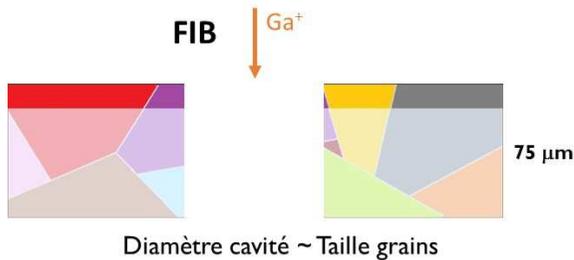
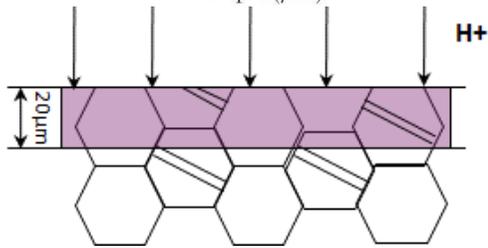
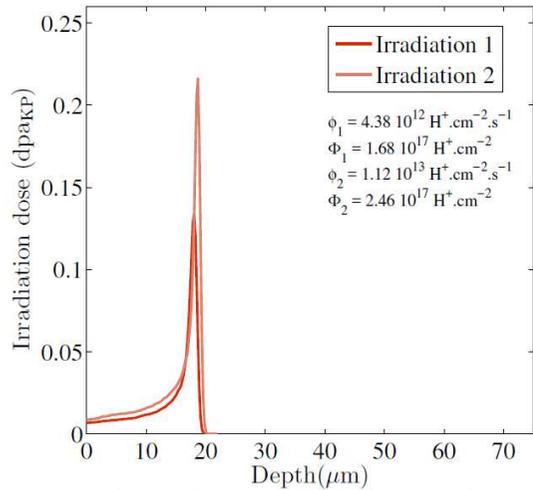
Irradié localisant



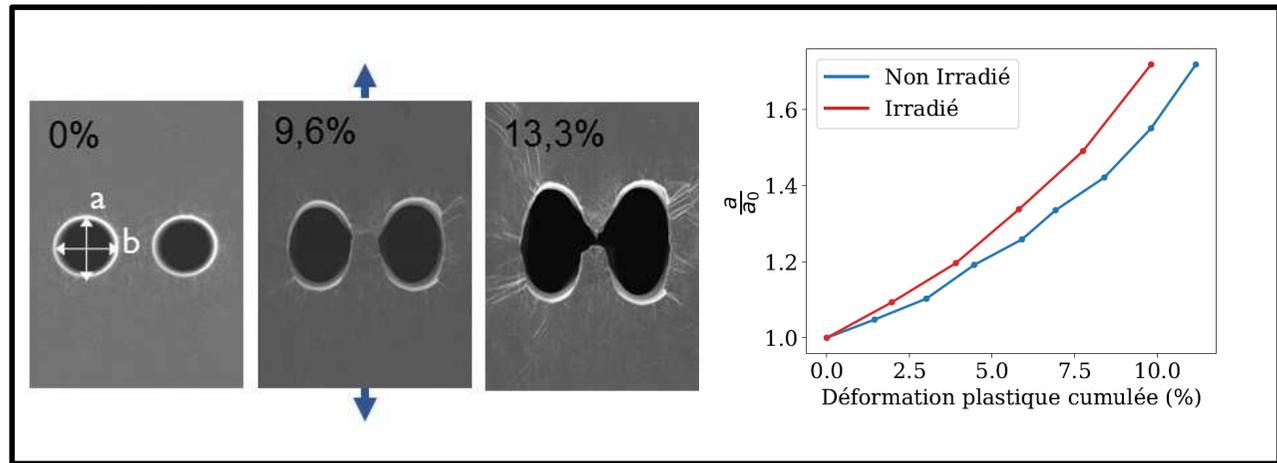
## Croissance et coalescence de cavités à l'échelle du polycristal



[Barrioz, Hure and Tanguy, J. Nuc Mater 502 (2018)]

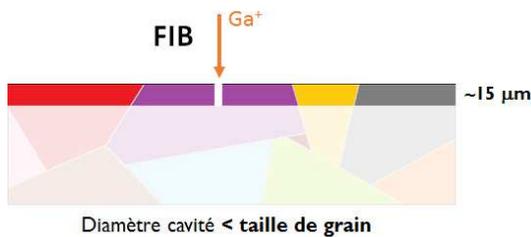
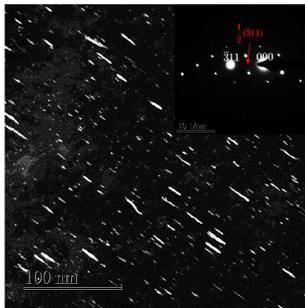
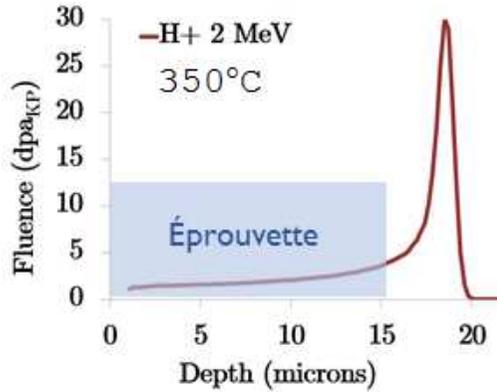


## Croissance et coalescence de cavités à l'échelle du polycristal

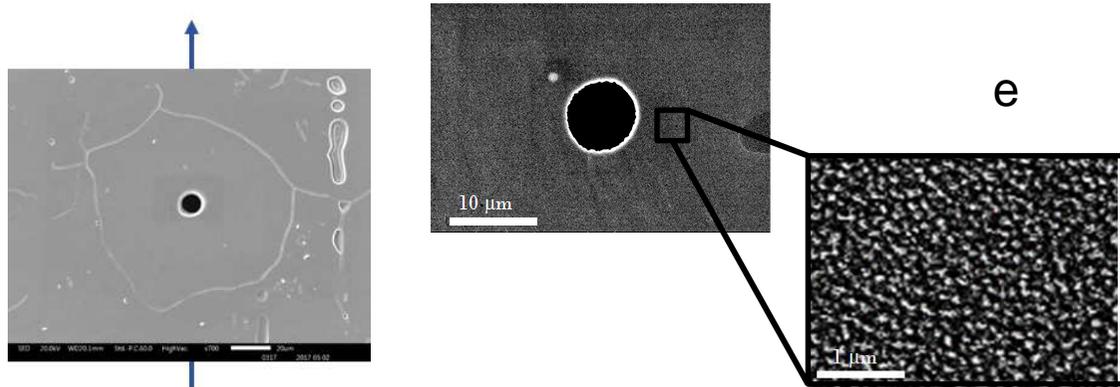


- Mécanismes de croissance identique état non irradié & irradié
- Croissance et coalescence **accélérée** des cavités dans le matériau irradié
- En accord avec une diminution de la ténacité avec l'irradiation

[Barrioz, Hure and Tanguy, J. Nuc Mater 502 (2018)]

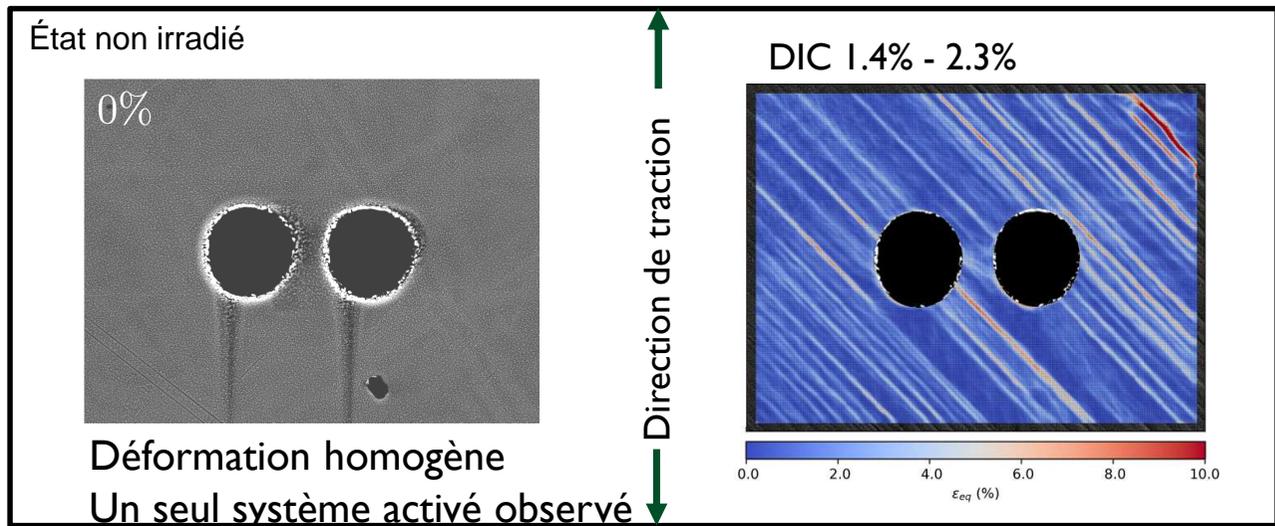


## Croissance et coalescence de cavité intragranulaire

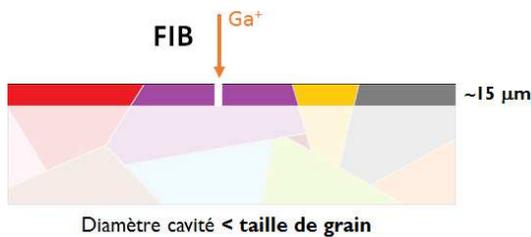
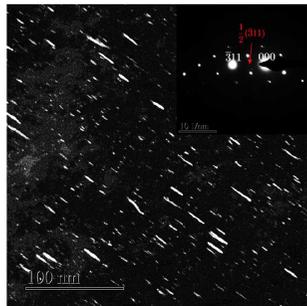
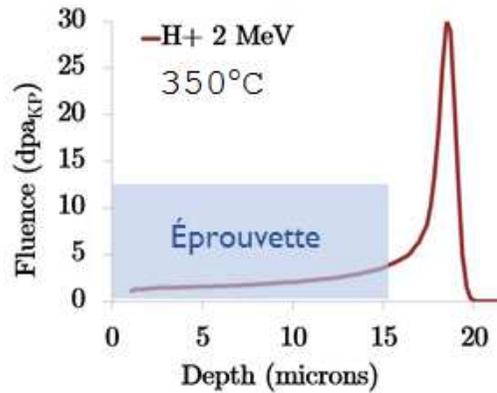


Traction (300°C)

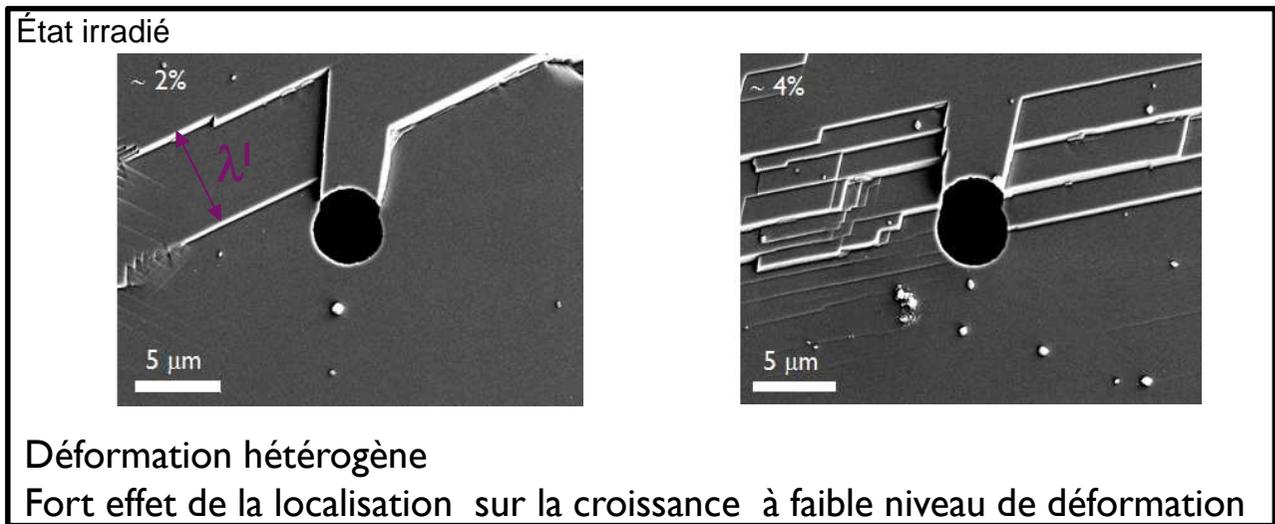
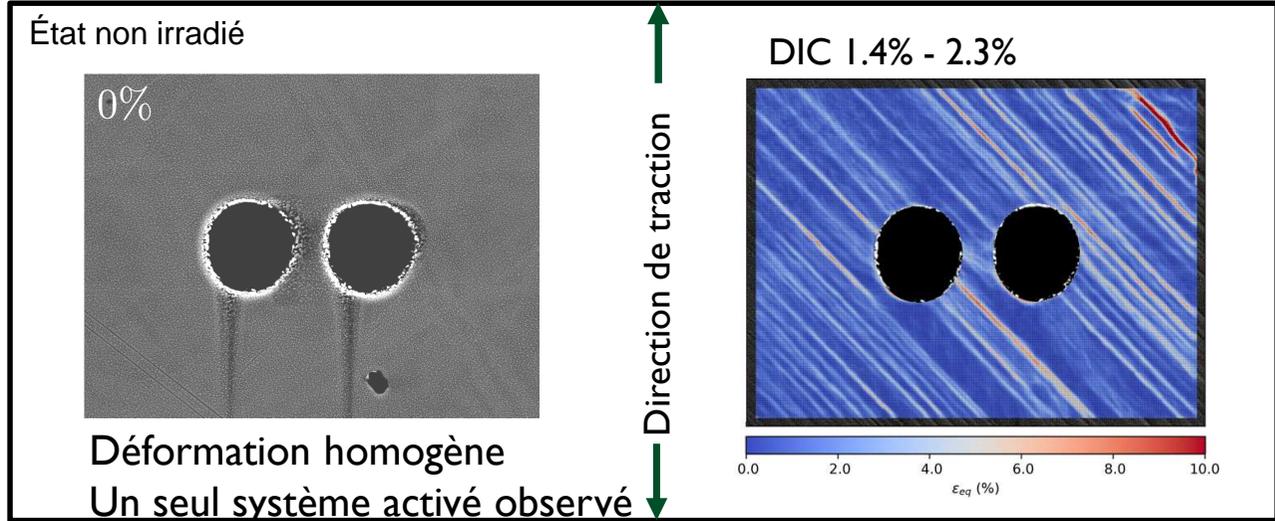
Mouchetis\* : Film d'or + remodelage

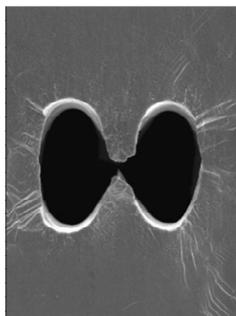
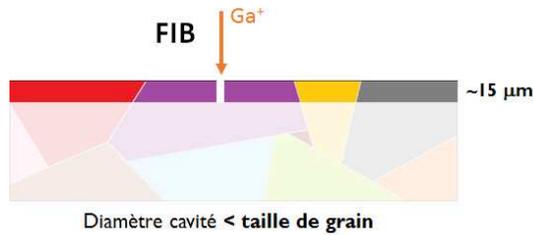
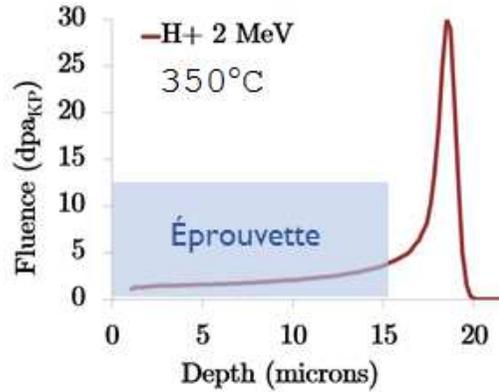


\*[Gioacchino & da Fonseca, 2013]



## Croissance et coalescence de cavités intragranulaire

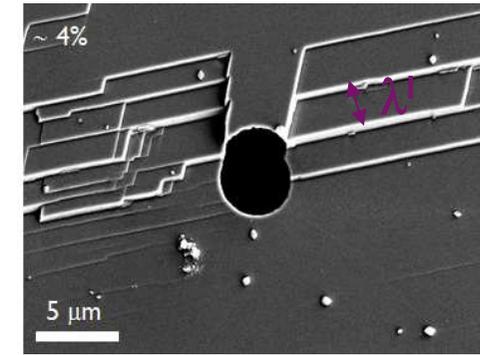
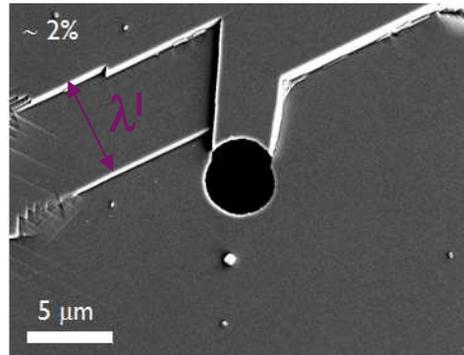




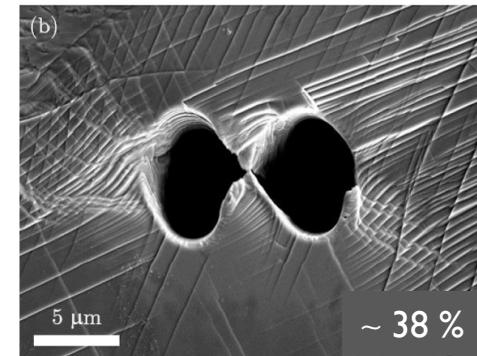
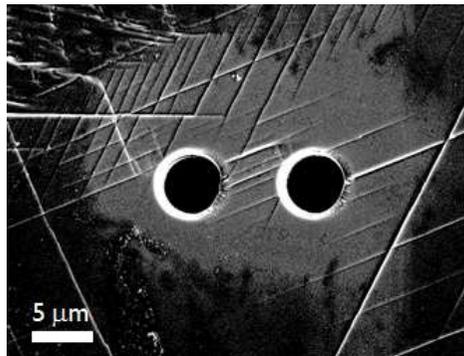
Non irradié

## Croissance et coalescence de cavités intragranulaire

État irradié



Augmentation du niveau de déformation

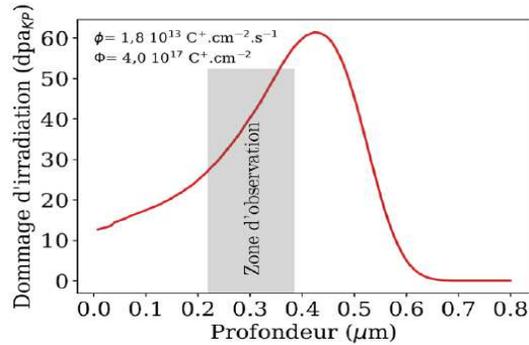


Diminution de l'espace interbande

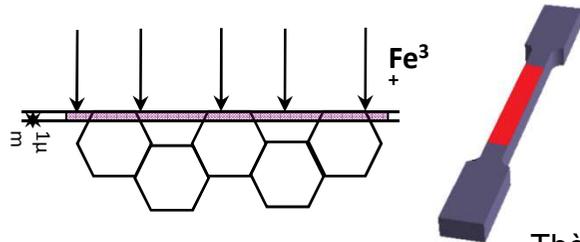
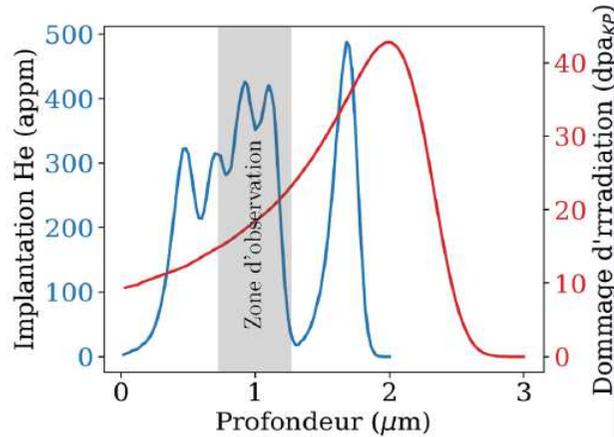
Forme des cavités après coalescence : état irradié ~ état non irradié

# cea den Déformation de cavités nanométriques

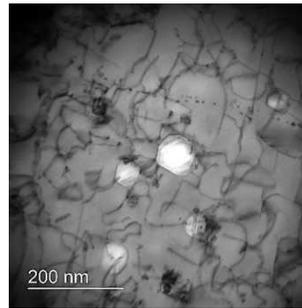
Ions lourds, 600°C → P1



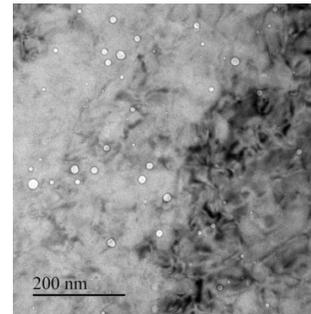
Ions lourds + He, 600°C → P2



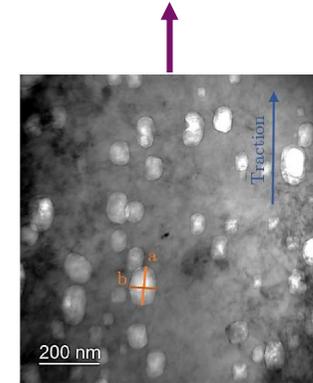
Déformation de cavités nanométriques, étude de l'effet de taille



∅ ~ 65 nm



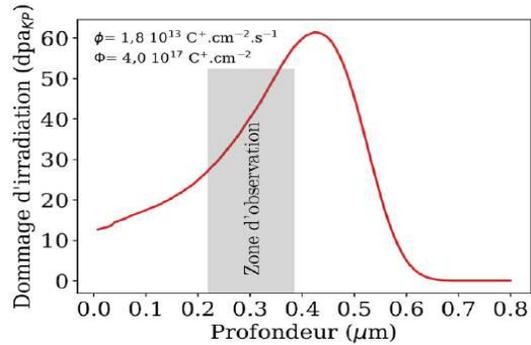
∅ ~ 8 nm



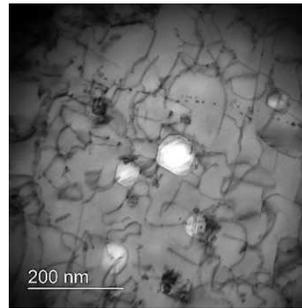
Traction, 300°C

Thèse Pierre-Olivier Barrioz, 8/01/2019

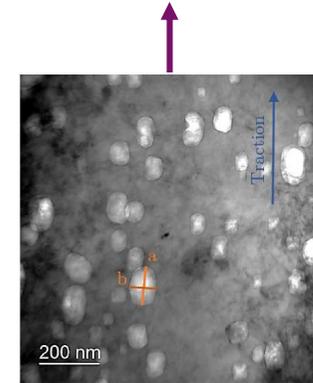
Ions lourds, 600°C → PI



Déformation de cavités nanométriques, étude de l'effet de taille

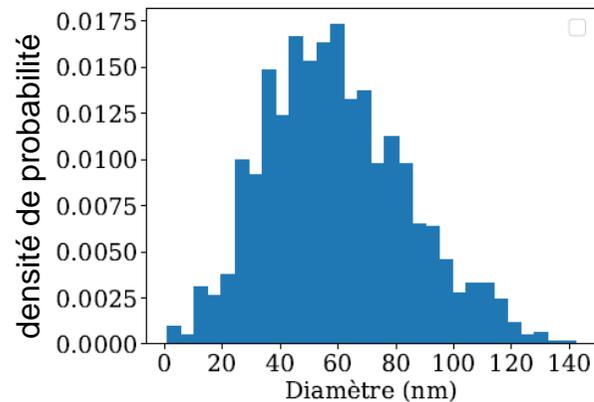


∅ ~ 65 nm

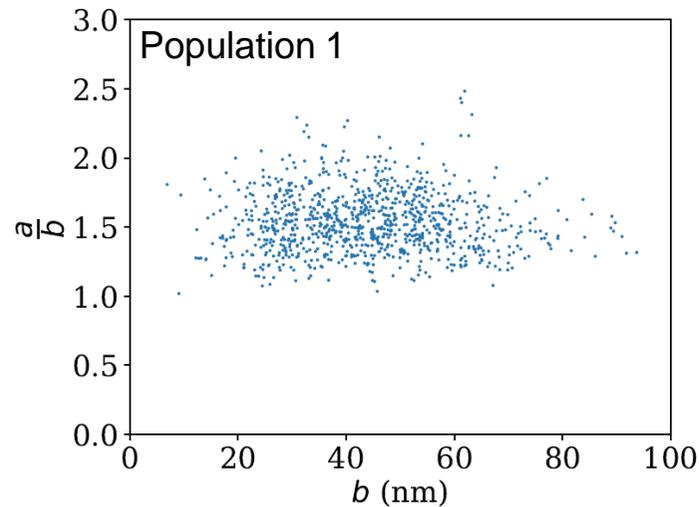


Traction, 300°C

Population I

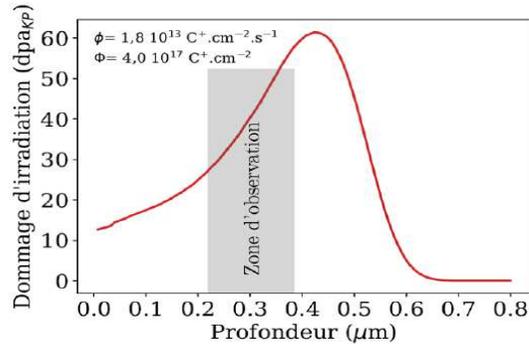


∅ ~ 65 nm

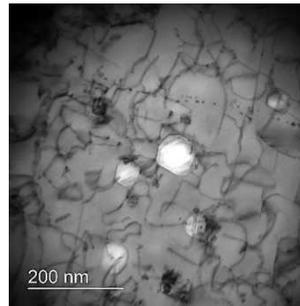


- > Forte dispersion
- > Pas d'effet d'échelle notable

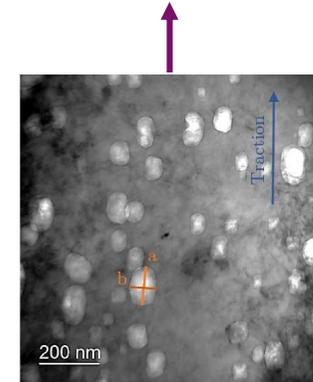
Ions lourds, 600°C → PI



Déformation de cavités nanométriques, étude de l'effet de taille

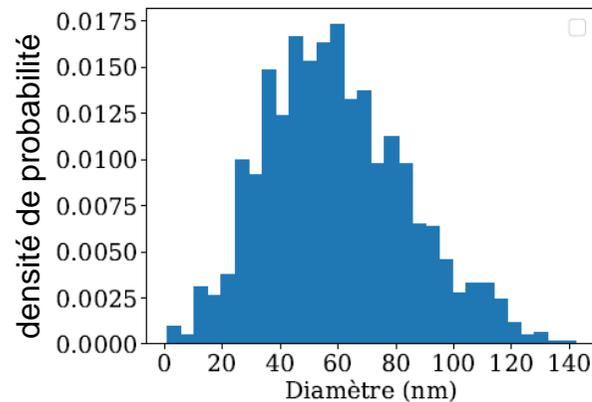


∅ ~ 65 nm



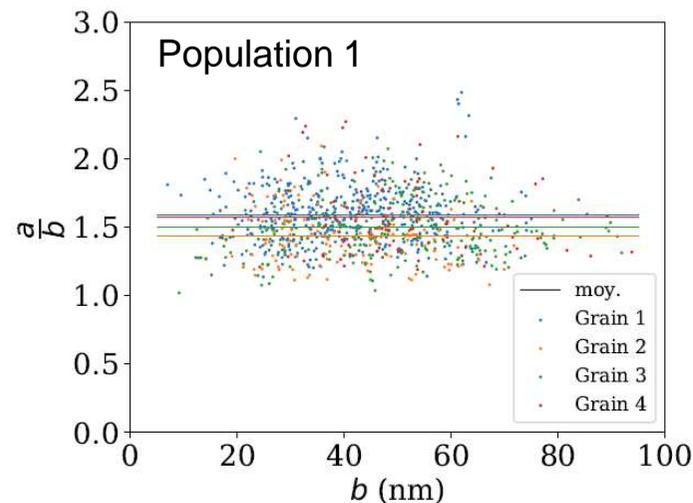
Traction, 300°C

Population I



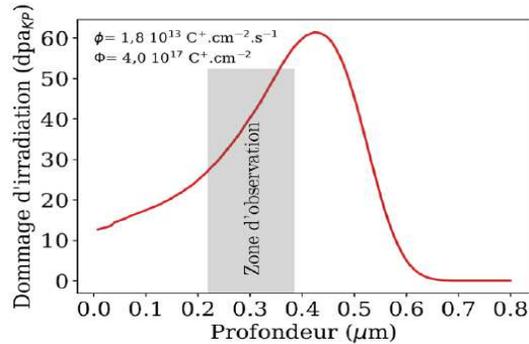
∅ ~ 65 nm

Effet de l'orientation cristallographique ?

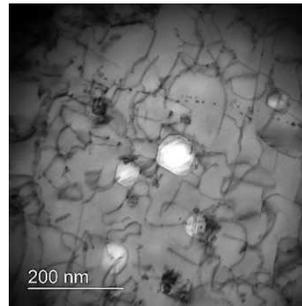


- Effet de l'orientation cristallographique
- Faible devant la dispersion

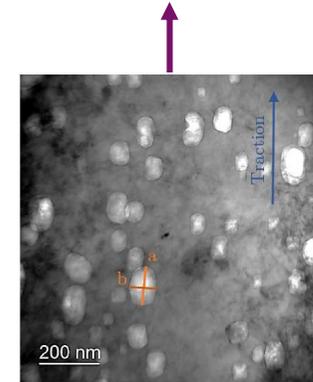
## Ions lourds, 600°C → PI



## Déformation de cavités nanométriques, étude de l'effet de taille

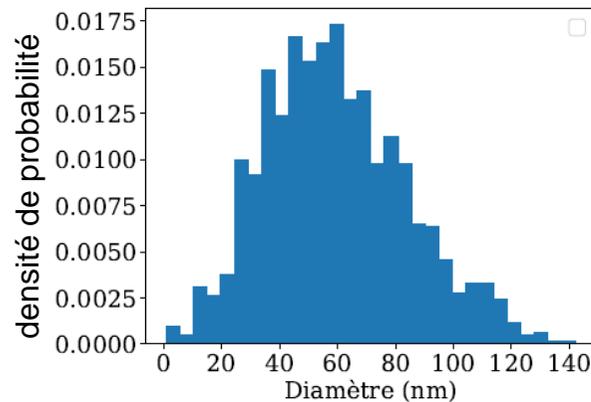


∅ ~ 65 nm



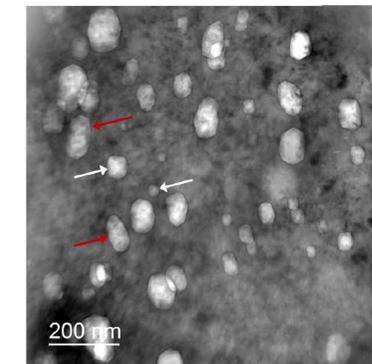
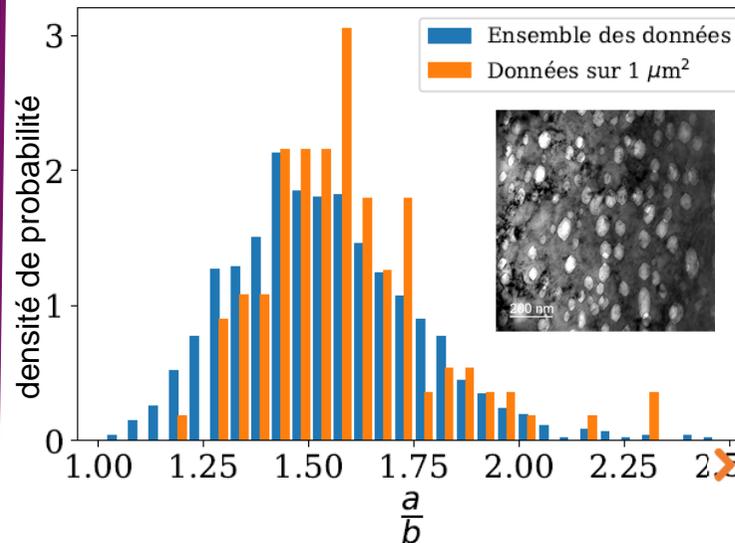
Traction, 300°C

## Population I



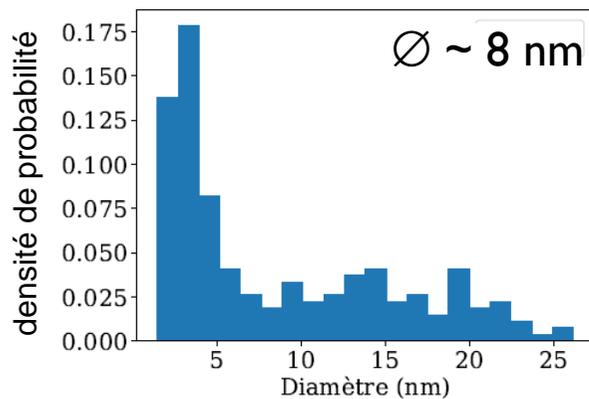
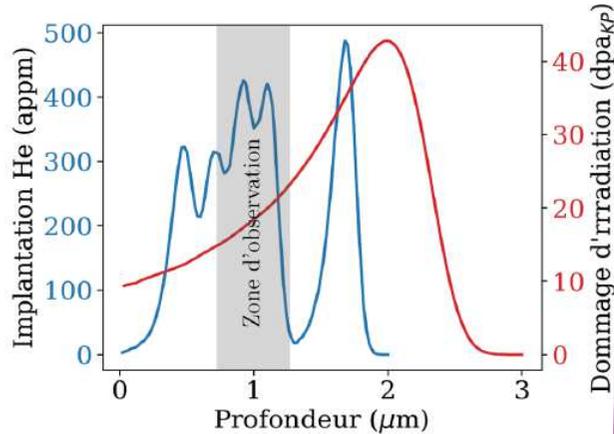
∅ ~ 65 nm

## Étude de la dispersion

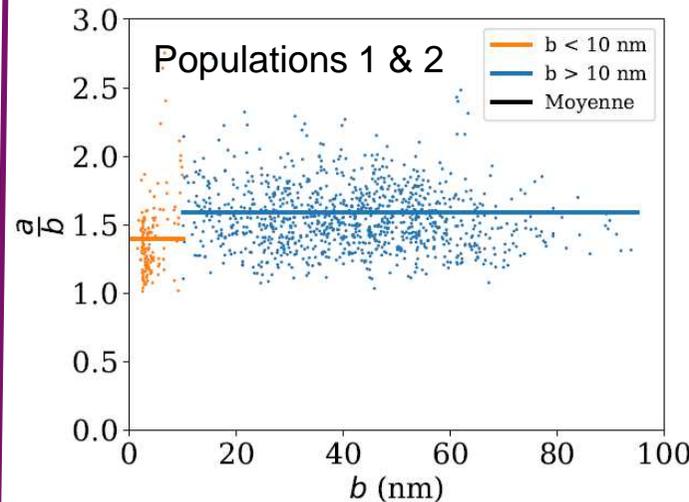
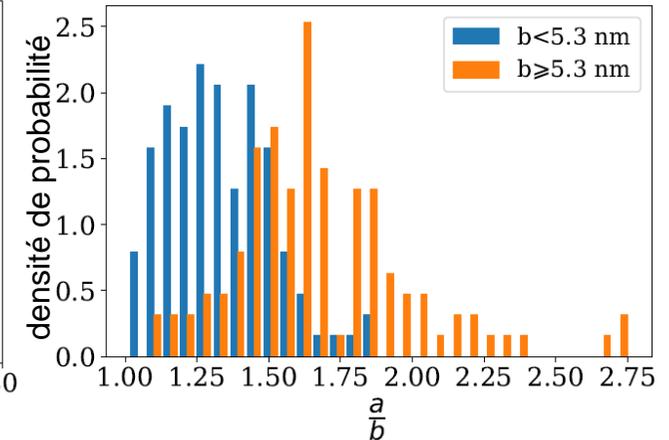
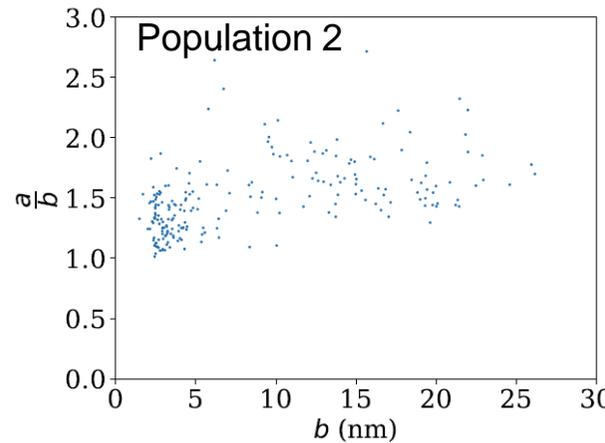


Hétérogénéité locale de la déformation

Ions lourds + He, 600°C → P2

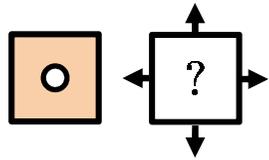


Déformation de cavités nanométriques, étude de l'effet de taille

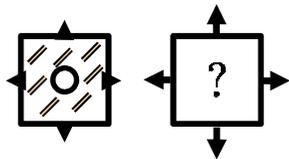


- Plus faible déformation des petites cavités
- Origine physique?
- Rôle dans la rupture ductile?

Thèse Pierre-Olivier Barrioz, 8/01/2019

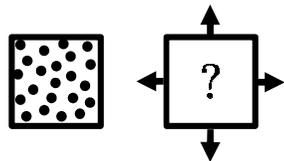


> Accélération de la croissance et coalescence due au durcissement



> Fort effet de la localisation aux faibles niveaux de déformation

> Atténuation de la localisation aux forts niveaux de déformation



> Déformation des nanocavités et effet d'échelle pour les plus petites

> Modèles et simulations pour étudier les mécanismes observés

> Lois cristallines

Non irradié, irradié non localisant, irradié localisant

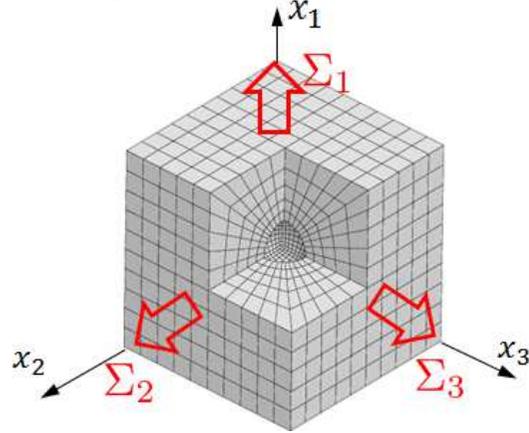
$$\dot{\gamma}^s = \left\langle \frac{|\tau^s| - \tau_c^s}{K} \right\rangle_+^n \text{sign}(\tau^s)$$

$$\tau_c^s = \tau_0 + \tau_\mu = \tau_0 + \mu b \sqrt{\sum_i a^{su} \rho^u}$$

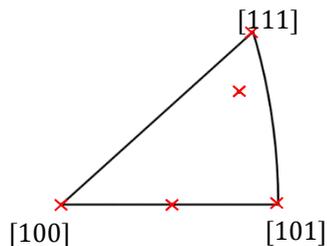
Glissement plastique :  $\tau^s \geq \tau_c^s$

$$\tau_c^s = \tau_0 + \Delta\tau_1 \exp\left(-\left(\frac{\gamma^s}{\gamma_0}\right)\right)$$

Calculs de cellule (VER)  
(hypothèse de distribution homogène de cavités)



- Axisymmetric loading  $\Sigma_2 = \Sigma_3$
- Constant stress triaxiality
- Different crystal orientations

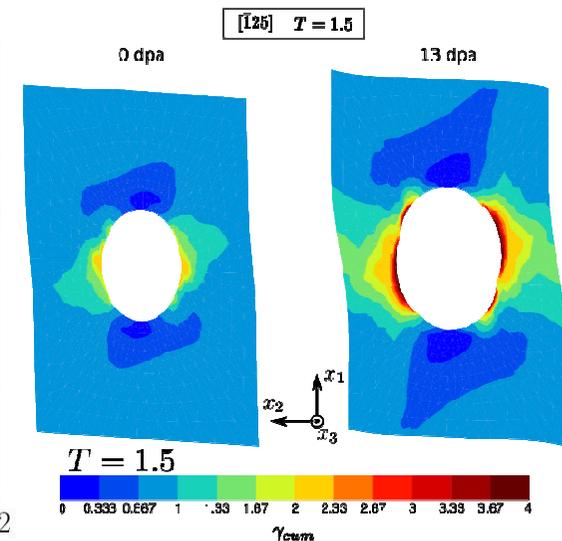
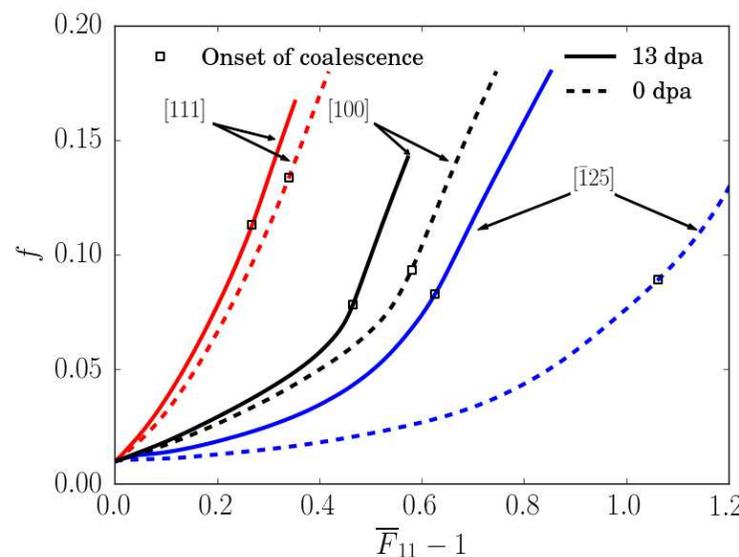


[Ling et al. Int J Plast. 84 (2016)]  
[Ling et al. J. Nuc Mater 492 (2017)]

Effet du durcissement d'irradiation

$$\tau_c^s = \tau_T^s + \underbrace{\mu b_D \sqrt{\sum_{u=1}^{12} a^{su} \rho_D^u} + \alpha_L \mu b_L \sqrt{\sum_{p=1}^4 \phi_L \rho_L^p} + \tau_a \exp\left(-\frac{\gamma^s}{\gamma_0}\right)}_{\text{Irradiation}}$$

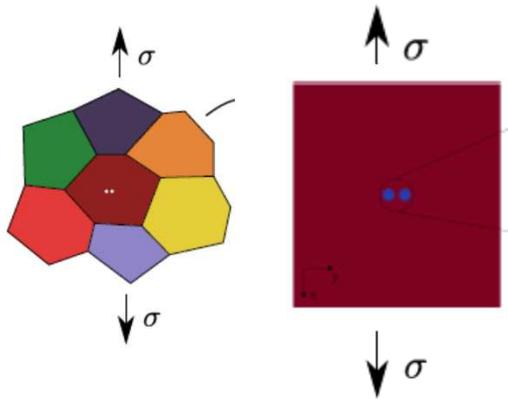
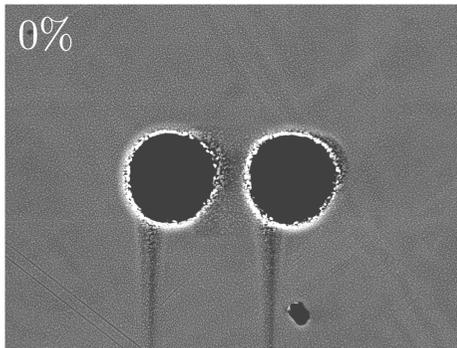
[Tanguy et al., Plasticity Conf., 2013]



- ✓ Accélération de la croissance et de la coalescence après irradiation
- ✓ Accélération de la croissance liée à la localisation plus marquée au voisinage de la cavité.

[see Yerra et al. For BCC crystal IJSS (2010)]

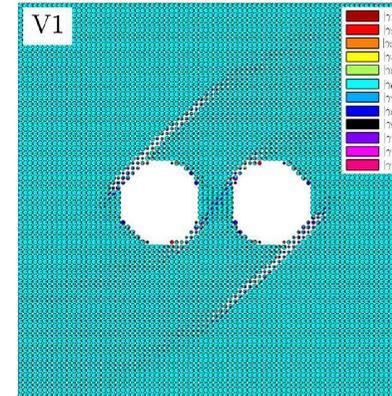
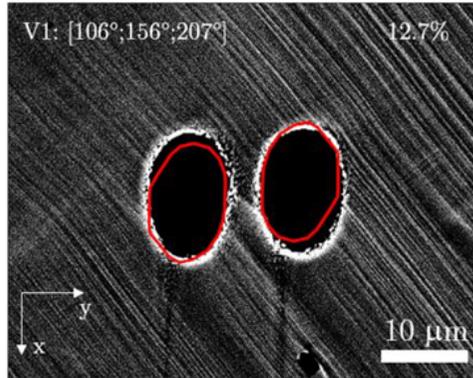
Traction simple  
CL périodiques (NI)  
Surface libre (irr)



Solveur FFT : AMITEX\_FFTP  
(L. Gélébart – CEA)

Etat non irradié

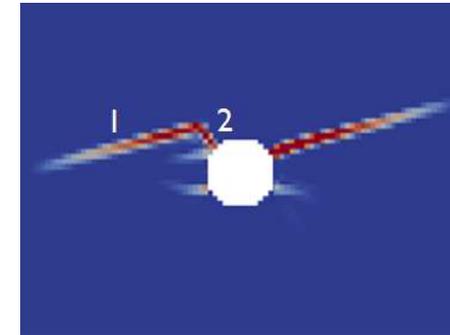
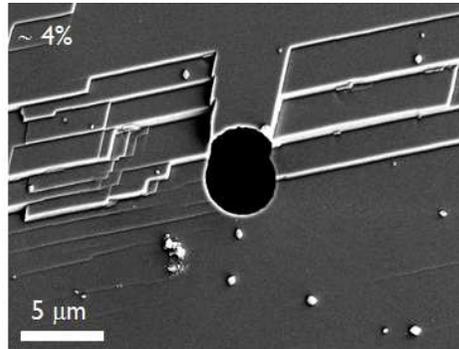
$$\tau_c^s = \tau_0 + \tau_\mu = \tau_0 + \mu b \sqrt{\sum_u a^{su} \rho^u}$$



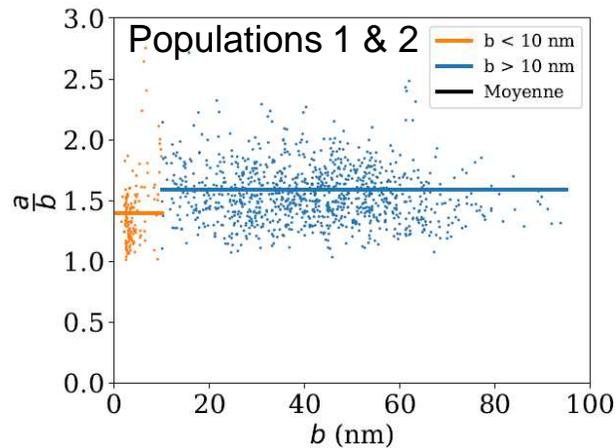
Bon accord simulations / exp. (accord sur 3/4 orientations)

Etat irradié

$$\tau_c^s = \tau_0 + \Delta\tau_1 \exp\left(-\frac{\gamma^s}{\gamma_0}\right)$$



1<sup>ère</sup> bande de localisation (1), (2) pas en accord avec exp.



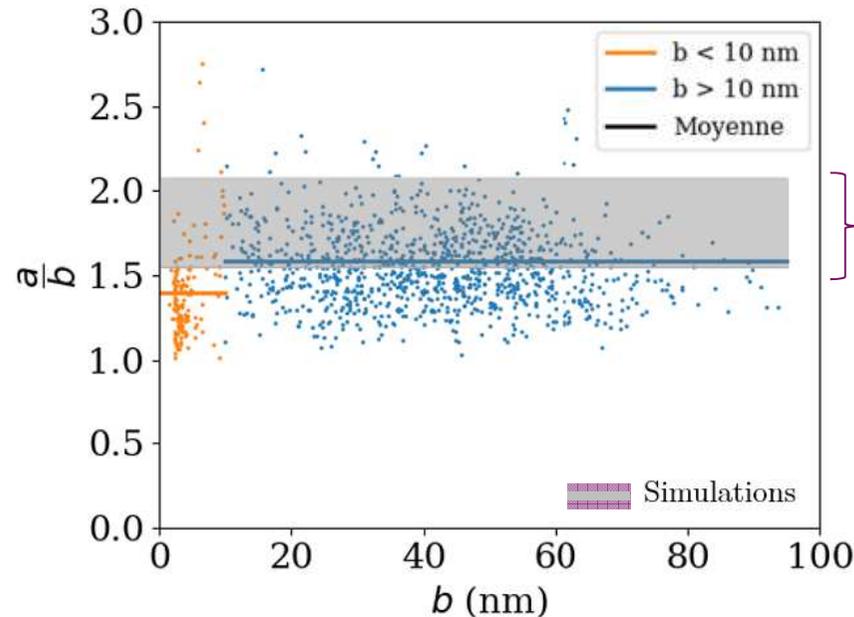
## ➤ Lois cristallines

$$\dot{\gamma}^s = \left\langle \frac{|\tau^s| - \tau_c^s}{K} \right\rangle_+ \text{sign}(\tau^s)$$

$$\tau_c^s = \tau_0 + \tau_\mu = \tau_0 + \mu b \sqrt{\sum_u a^{su} \rho^u}$$

$$\dot{\rho}^s = \frac{1}{b} \left( \frac{\sum b^{su} \rho^u}{\kappa} - G_c \rho^s \right) |\dot{\gamma}^s|$$

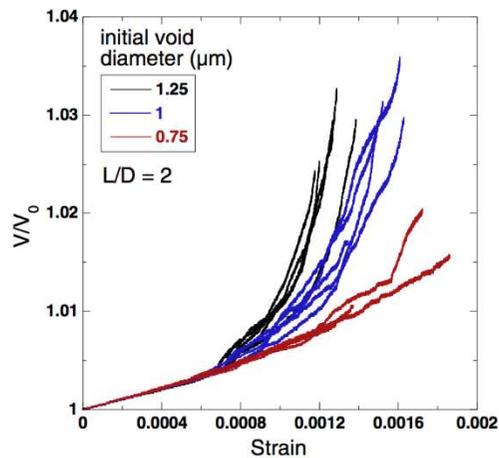
## Déformation de cavités nanométriques, étude de l'effet de taille Simulations de références



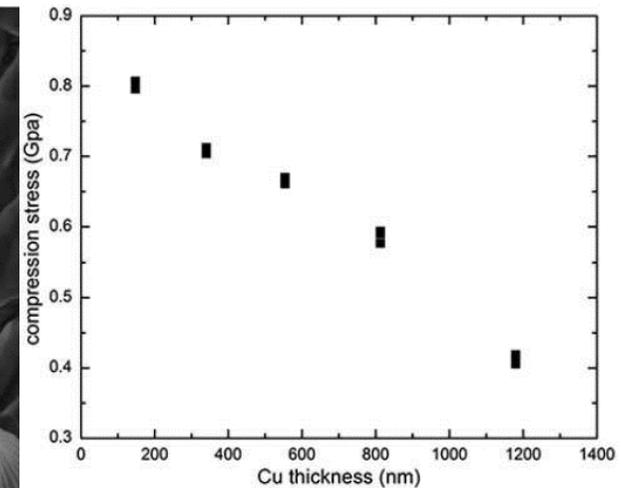
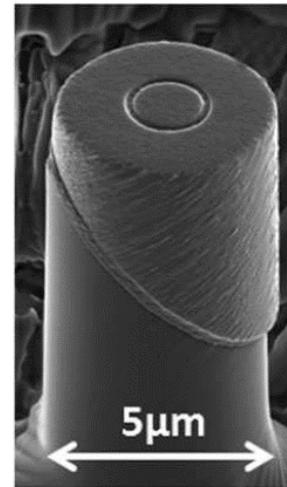
Effet de l'orientation cristallographique

- Déformation moyenne surestimée par la modélisation pour cavités > 10 nm -> Effet de taille ?
- Déformation moyenne surestimée par la modélisation pour cavités < 10 nm
- Prise en compte des effets d'échelle dans la modélisation

Effets de taille : durcissement et ralentissement de la croissance pour les petites cavités [=f(f<sub>0</sub>,τ)]



Simulation de dynamique des dislocations 3D  
(Chang et al., 2015)



(Mu, Chen, Meng, MRS, 2014)

Effets de taille : durcissement et ralentissement de la croissance pour les petites cavités [=f(f<sub>0</sub>,τ)]

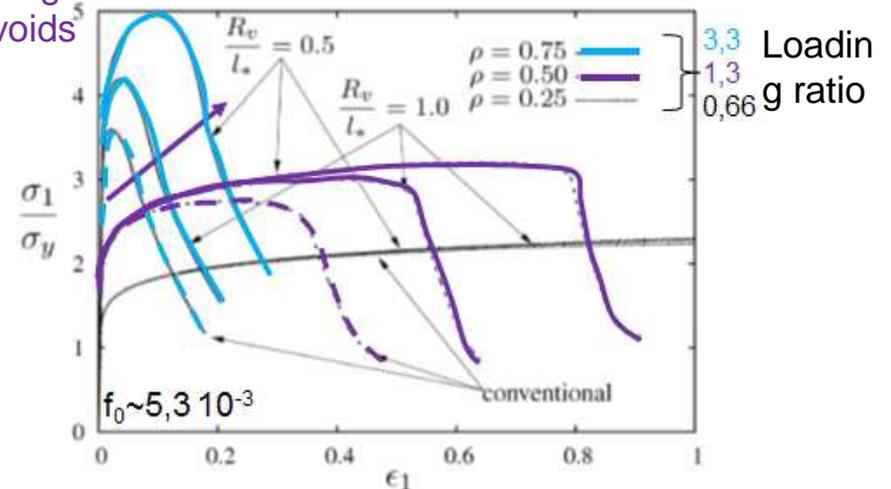
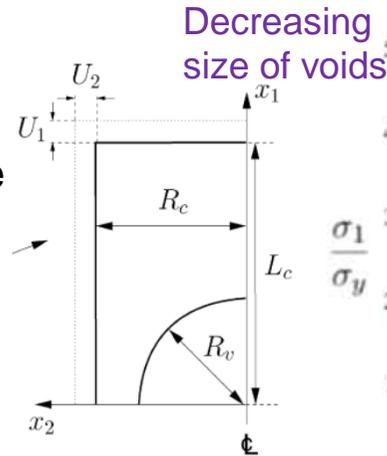
## Effets de taille :

- hétérogénéité de la déformation
- gradients de la déformation plastique

Cadre de la plasticité à gradient

$$\delta w^p = \int_V s \delta p + \underline{m} \cdot \delta \nabla p dV,$$

Fleck and Hutchinson, JMPS, 2001



C.F Niordson, Eur. J. Mech A/Solids 2008

Shu, IJP, 1998, Gurtin et al. 2002, Borg & Kysar, IJSS, 2007, Wulfinghoff & Böhlke, PRSA, 2012

Description des effets de taille : proposition d'un modèle de plasticité monocristallin micromorphe

$$P^i = \int_D \underline{\sigma} : \text{grad } \underline{\dot{u}} + s \dot{\gamma}_\chi + \underline{m} \cdot \text{grad } \dot{\gamma}_\chi dV \quad \gamma_\chi \text{ DDL supplémentaire : microdéformation}$$

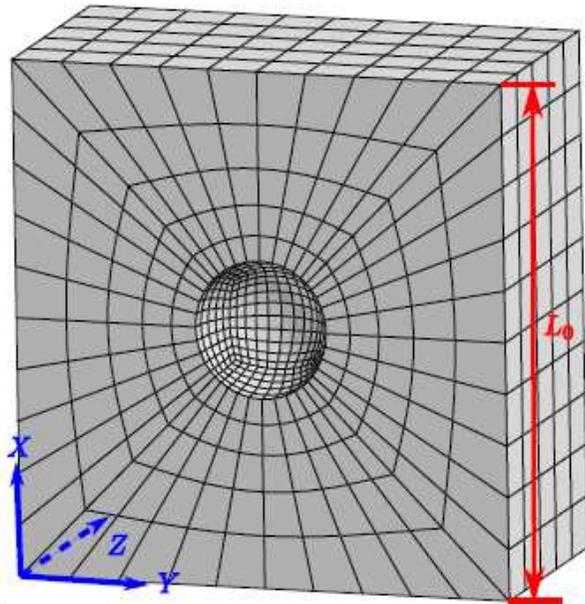
$$\text{DOF} = \{\underline{u}, \gamma_\chi\} \text{ and } e(\underline{X}, t) = \int_0^t \sum_s |\dot{\gamma}^s| dt - \gamma_\chi = \gamma_{cum} - \gamma_\chi : \text{Glissement plastique relatif}$$

$$|\tau^s| - (\tau_c^s(\gamma_{cum}) - H_\chi(\gamma_\chi - \gamma^s)) \geq 0$$

[Ling et al., IJSS, 134 2018]

Effet d'échelle sur la croissance et la coalescence de cavités modèles

$\lambda_c$  : longueur caractéristique du modèle

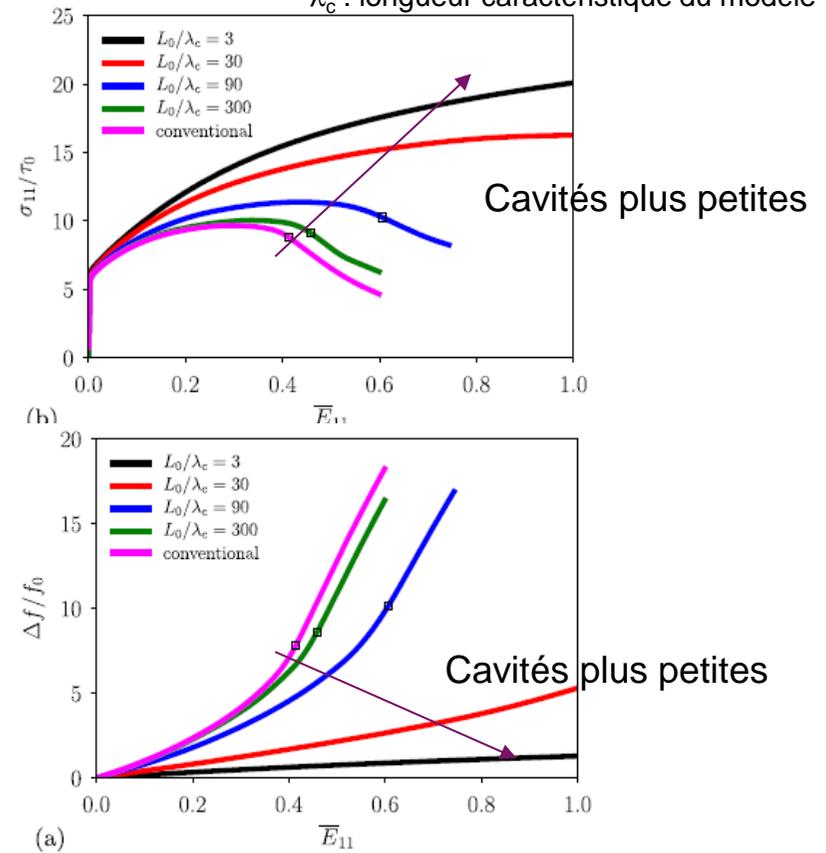


Cavité sphérique

Chargement triaxial,  $T = \frac{\bar{\sigma}_m}{\bar{\sigma}_{eq}} = 2$

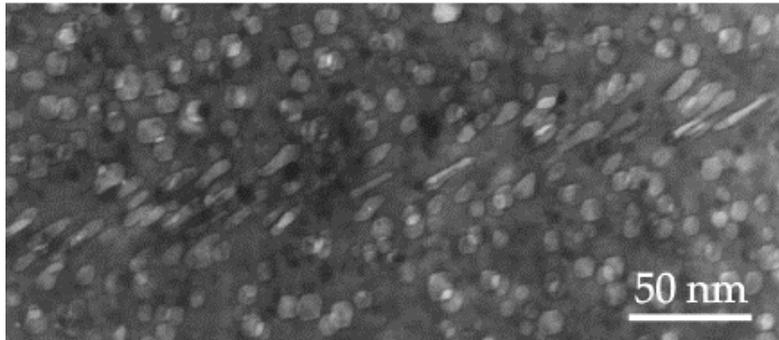
$f_0 = 0.01$  [100]-[010]-[001]

(Cavité cylindrique en chargement biaxial, voir [Ling et al., IJSS, 134 2018])



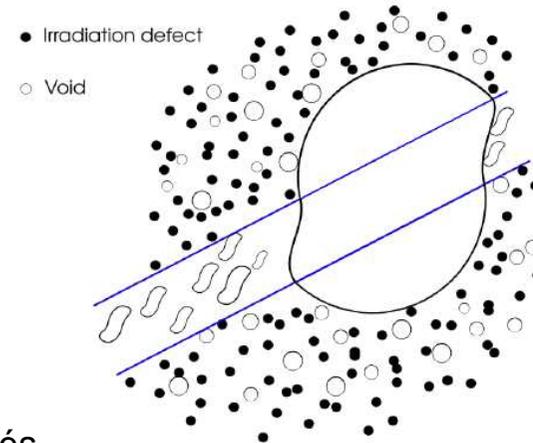
- Effet d'échelle résultant du modèle proposé
- Vitesse de croissance diminue et retard de la phase de coalescence pour les petites cavités
- Confrontation aux données expérimentales ?

Effet de taille : étude de l'interaction cavité / bande de localisation



[Fish and Hunter, 1976]

Largeur d'un canal de localisation ~10-200nm



Comportement adoucissant dans la bande / interaction avec les cavités

Bande de localisation bornée : extension du modèle de plasticité monocristallin micromorphe

$$P^i = \int_D \boldsymbol{\sigma} : \text{grad } \dot{\mathbf{u}} + s \dot{\gamma}_X + \underline{m} \cdot \text{grad } \dot{\gamma}_X dV$$

$$\text{DOF} = \{\mathbf{u}, \gamma_X\} \text{ and } e(\mathbf{X}, t) = \int_0^t \sum_s |\dot{\gamma}^s| dt - \gamma_X = \gamma_{cum} - \gamma_X$$

$$\tau^s - (\tau_c^s - A \Delta_X \gamma_X) \geq 0$$

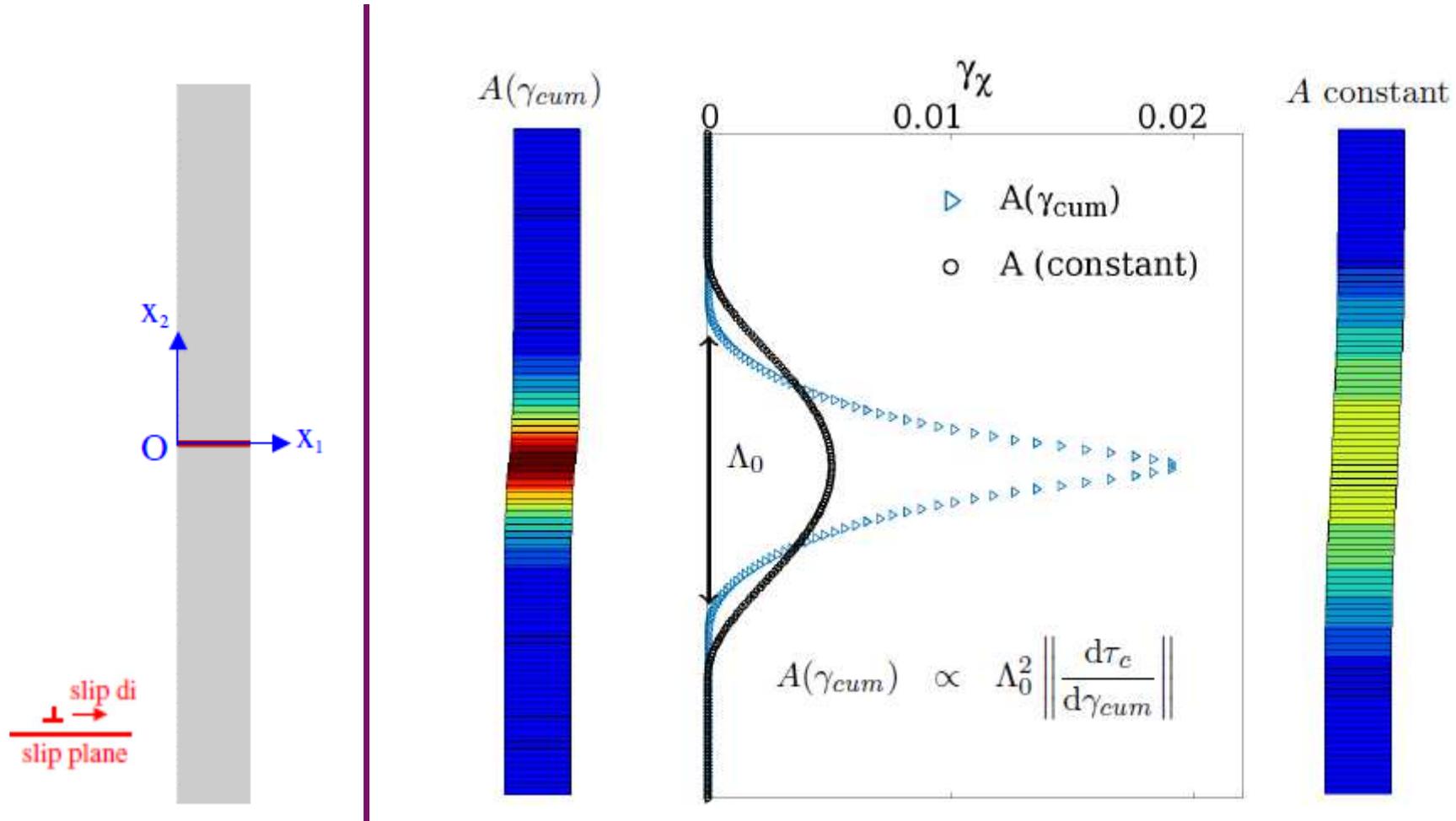


$$\tau_c(\gamma_{cum}) = \tau_0 + \tau_a \exp\left(-\frac{\gamma_{cum}}{\gamma_0}\right)$$

$$+ A(\gamma_{cum}) \propto \left\| \frac{d\tau_c}{d\gamma_{cum}} \right\|$$

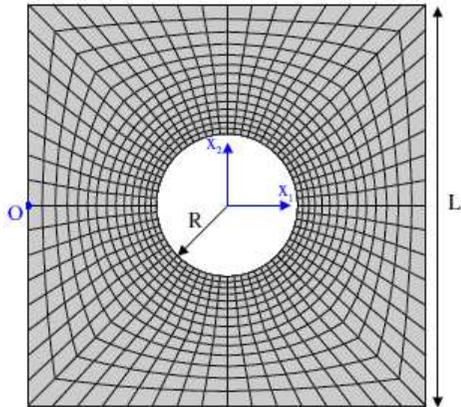
[Scherrer et al., submitted to EJM/A Solids] [Scherrer et al., MMM2018, Osaka, 2018]

Effet de taille : étude de l'interaction cavité / bande de localisation



$$\tau_c(\gamma_{cum}) = \tau_0 + \tau_a \exp\left(-\frac{\gamma_{cum}}{\gamma_0}\right)$$

Cellule périodique perforée



Largeur de la bande de localisation :

$$\Lambda_0 = 100 \text{ nm}$$

Glissement simple imposé

$\bar{F}$  imposé tel que

$$\bar{\underline{F}} = \underline{1} + \bar{F}_{12} \underline{\ell} \otimes \underline{n}$$

$$\tau_c(\gamma_{cum}) = \tau_0 + \tau_a \exp\left(-\frac{\gamma_{cum}}{\gamma_0}\right)$$

Effet de taille : étude de l'interaction cavité / bande de localisation

Etude sur l'évolution de l'interaction cavité/bande de localisation en fonction de :

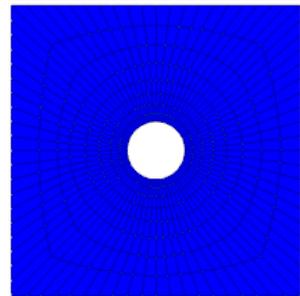
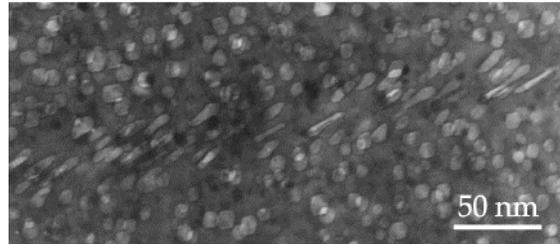
$$q_0 = \frac{\Lambda_0}{R} \sim \text{ratio largeur de la bande / taille de cavité} \sim \text{taille de cavité normalisée}$$

$$\chi_0 = \frac{R}{L} \sim \text{espace entre cavités} \sim \text{porosité}$$

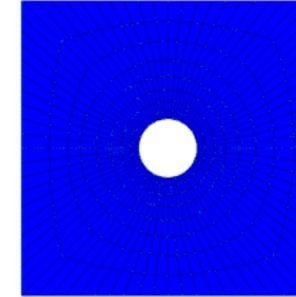
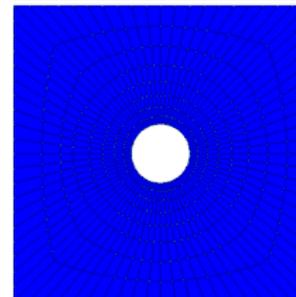
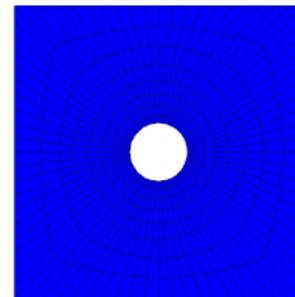
# Modélisation des effets de l'irradiation sur le comportement de cavités intragranulaires

Effet de taille : étude de l'interaction cavité / bande de localisation

Modèle micromorphe  
étendu A ( $\gamma_{cum}$ )



0,1



3

6

$q_0 = \Lambda_0/R$

$\gamma$

0.50

0.45

0.40

0.35

0.30

0.25

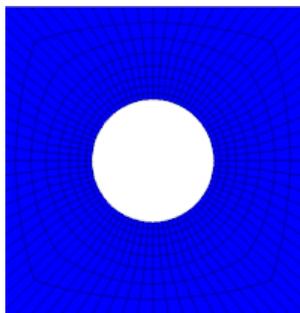
0.20

0.15

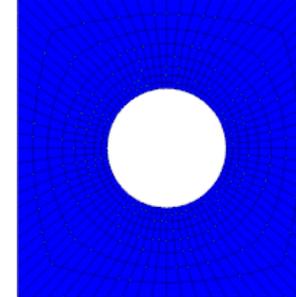
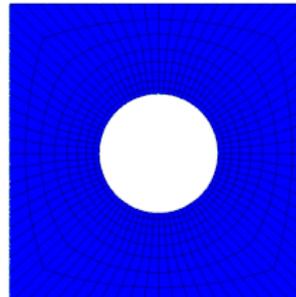
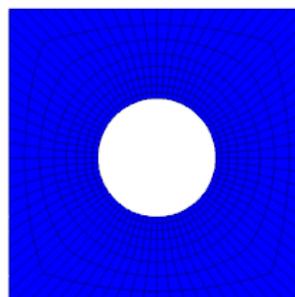
0.10

0.05

0.00

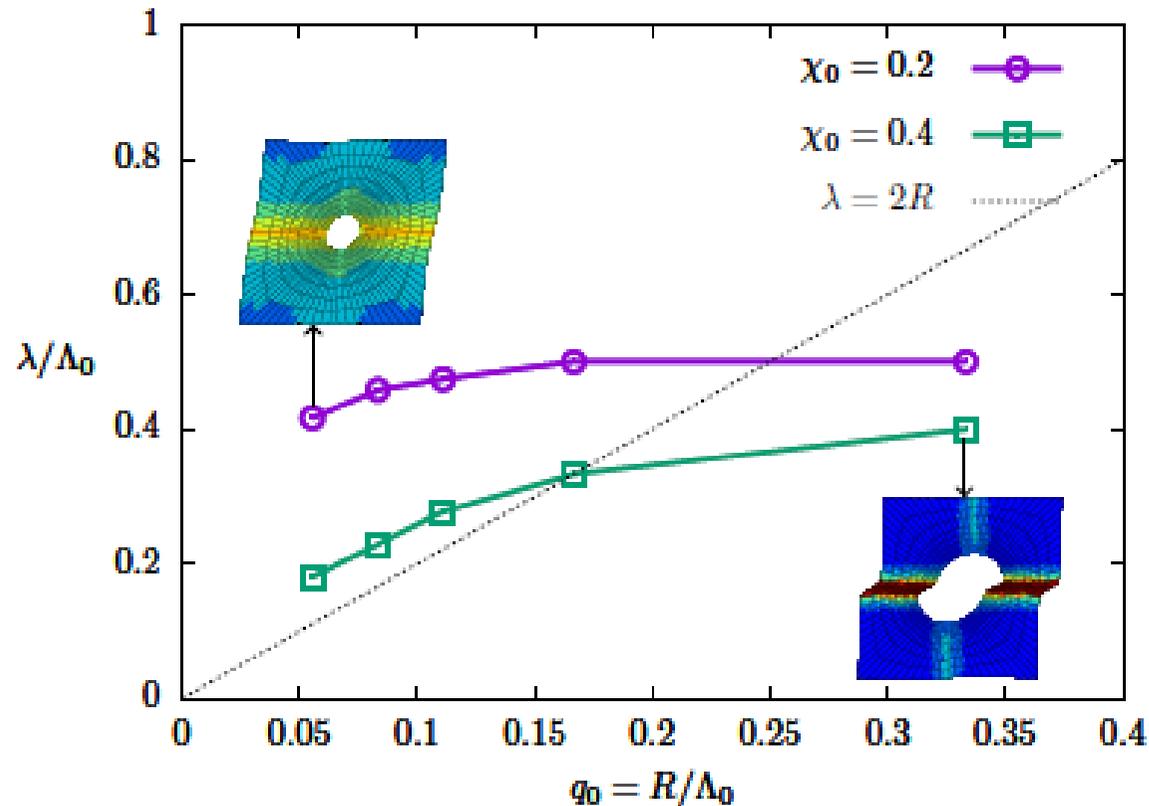


0,2

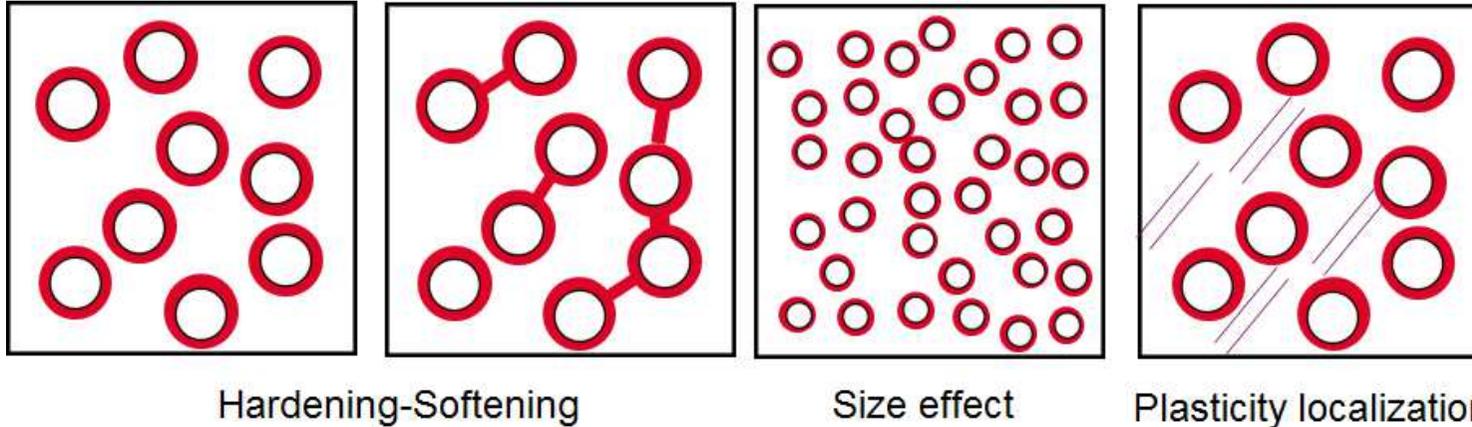


$\chi_0 = R/L$

Effet de taille : étude de l'interaction cavité / bande de localisation



- Largeur de la bande ( $\lambda$ ) = f(taille normalisée, porosité)
- Cavités les plus petites ont un effet le plus marqué sur la largeur de la bande de localisation
- Retour à la rupture ductile ....

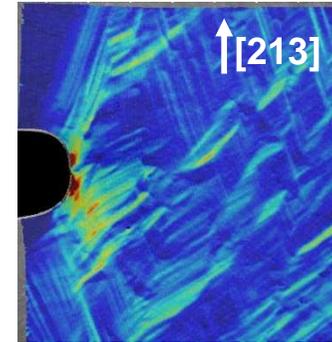


■ Irradiation : introduction de nouvelles longueurs caractéristiques (plasticité, endommagement)

■ Dialogue expériences modèles / simulations pour étudier la croissance et la coalescence des cavités aux différentes échelles d'intérêt

Nombreuses .....Compréhension / Modélisation

- Aller vers des états mécaniques proche d'une fissure dans les expériences analytiques et étudier la ténacité en fonction de la microstructure
- Besoin de modèles CP enrichis / simulation des canaux de localization ?
- .....
- Modélisation de l'évolution de la ténacité dans les matériaux (CFC) irradiés



Monocrystal 316L [EDF R&D]



# Merci pour votre attention!



[benoit.tanguy@cea.fr](mailto:benoit.tanguy@cea.fr)

Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives  
Centre de Saclay | 91191 Gif-sur-Yvette Cedex  
T. +33 (0)1 69 08 17 25 | F. +33 (0)1 69 08 93 24

Direction DEN  
Department of Materials for Nuclear  
Applications

Etablissement public à caractère industriel et commercial | RCS Paris B 775 685 019