

Une stratégie pour éliminer les défauts ponctuels d'un matériau

A. VATTRÉ / CEA – DAM Île-de-France
T. JOURDAN - M.-C. MARINICA / CEA – Saclay

L'irradiation d'un matériau métallique par des neutrons, des ions ou des électrons de forte énergie engendre le déplacement de défauts (atomes individuels ou en amas) qui altèrent les propriétés mécaniques de ces matériaux. Une modélisation multi-échelle conçue par le CEA a démontré que certaines interfaces contribuent à réduire considérablement la concentration de défauts d'irradiation dans les matériaux.

Sous irradiation, la sursaturation en défauts ponctuels provoque l'agglomération de ces défauts en amas, qui dégradent le comportement mécanique d'un matériau cristallin jusqu'à localiser l'endommagement et favoriser l'amorçage des fissures. Une idée simple pour remédier à ces problèmes consiste à élaborer des matériaux possédant une grande densité de « puits » qui éliminent de manière efficace ces défauts. Ces puits peuvent être des interfaces hétérophases ou des joints de grain (interfaces homophases). Il existe une variété infinie d'interfaces qui n'ont pas la même efficacité pour éliminer les défauts créés. Il apparaît donc nécessaire de conduire une approche multi-

échelle permettant d'évaluer les forces de puits de ces interfaces de manière systématique, afin d'être capable de concevoir des matériaux fonctionnels ayant une microstructure optimisée pour la tenue mécanique sous irradiation.

L'étude multi-échelle

Une interface peut être définie comme la surface entre deux matériaux dissemblables. Ces interfaces peuvent différer par leur désorientation, leur composition chimique et leur structure cristallographique, comme c'est le cas pour le joint de grain de torsion dans un plan (001) dans l'argent, et l'interface hétérophase entre l'argent et le

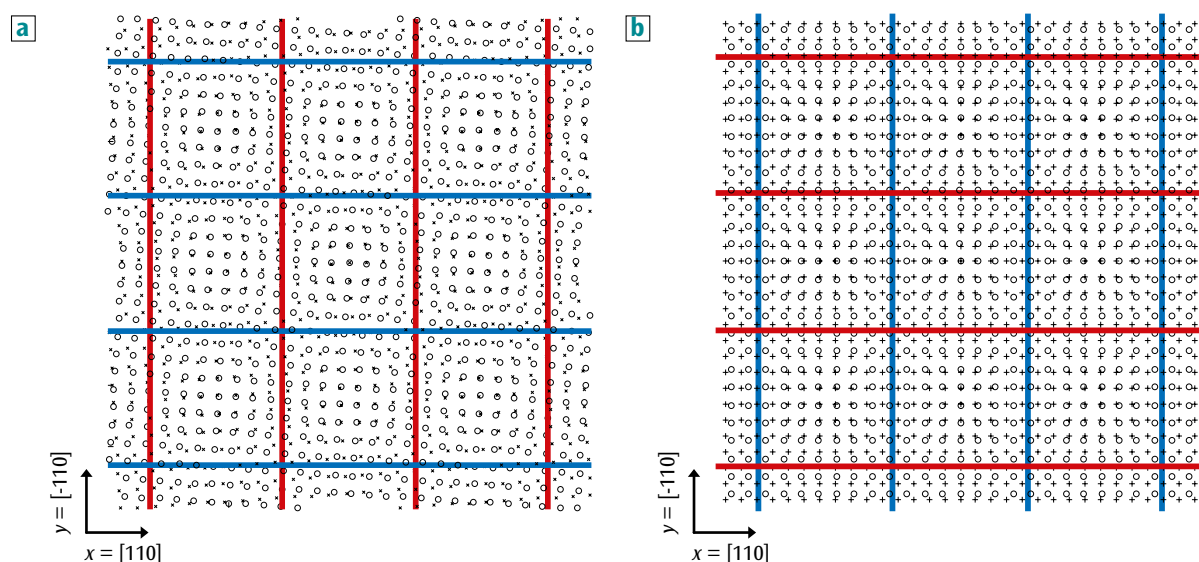


Figure 1. Représentation d'une interface semi-cohérente. Les cercles représentent les atomes du matériau immédiatement situé au-dessus de l'interface et les croix au-dessous. (a) Pour un joint de grain argent/argent, les réseaux cristallins sont pivotés d'un certain angle (de signe opposé). (b) Pour une interface hétérophase cuivre/argent, les atomes sous l'interface n'ont pas le même paramètre de maille. Dans ces deux interfaces, un réseau de dislocations paramétriques est formé afin d'accommoder (a) une désorientation et (b) une différence de paramètres de maille.

civre (**figure 1**). Ces interfaces sont qualifiées de semi-cohérentes, car il n'existe pas de coïncidence parfaite lorsque les atomes des deux matériaux se rencontrent. Un grand nombre de positions sont toutefois préservées et sont séparées par des lignes de mauvais accord cristallographique, appelées réseaux de dislocations paramétriques (en rouge et bleu sur la figure), que l'on peut rapprocher de figures de moiré obtenues soit par rotation (**figure 1a**), soit par homothétie (**figure 1b**). Ces défauts linéaires génèrent des champs de contraintes élastiques à courte distance à proximité des interfaces qui peuvent interagir avec d'autres sources de contraintes internes, comme celles produites par les défauts d'irradiation.

Afin de caractériser ces interactions élastiques, l'approche multi-échelle utilise trois types de méthode : les calculs à l'échelle atomique (*ab initio*) pour les défauts ponctuels (lacunes et interstitiels) créés par irradiation, les calculs en élasticité anisotrope et hétérogène pour les propriétés élastiques des interfaces et enfin les simulations de Monte-Carlo cinétique sur objets pour l'étude du couplage entre les défauts créés et les interfaces. Bien que le champ élastique complet des réseaux de dislocations annule les contraintes de cohérence à longue distance [1], ces deux composantes ne s'annulent pas à courte distance, ce qui génère des champs élastiques très hétérogènes, biaise la diffusion des espèces présentes dans les matériaux et donne lieu à une force de puits significative pour l'absorption des défauts ponctuels [2].

Forces de puits

Pour évaluer les forces de puits, un apport uniforme et constant de défauts ponctuels qui peuvent interagir avec les interfaces considérées a été simulé dans le code Monte-Carlo cinétique sur objets. Sans interaction, la force de puits simulée a parfaitement été confrontée aux résultats analytiques dans le cas de la diffusion lacunaire et interstitielle. Les résultats montrent que les forces de puits, en tenant compte des interactions élastiques, sont largement supérieures près des interfaces à celles obtenues sans interaction et donc aucun interstitiel n'est présent à environ 2 nm de part et d'autre de l'interface hétérophase. Cela reflète la capacité séduisante de l'interface argent/cuivre à éliminer des défauts ponctuels.

Afin de mettre en évidence les paramètres ayant un rôle prépondérant dans l'absorption des défauts, des calculs simplifiés ont été réalisés. Les résultats

indiquent que cette approximation entraîne une diminution très significative de la force de puits. En somme, l'anisotropie des défauts d'irradiation, négligée dans de nombreuses études de la littérature, est en grande partie responsable de la force de puits des interfaces considérées. La **figure 2** montre les trajectoires des interstitiels migrant préférentiellement vers le centre des dislocations. Ce caractère non aléatoire de la trajectoire des défauts dans un champ élastique créé par l'interface constitue un enjeu prometteur dans la conception de matériaux sur mesure afin de garantir une bonne tenue des matériaux sous irradiation.



Figure 2. Trajectoires moyennes de diffusion des interstitiels (courbes grises) vers le centre des dislocations (quadrillage en bleu foncé). La concentration de défauts au niveau de l'interface est représentée par le dégradé de couleur.

Références

- [1] A. VATTRÉ, M. J. DEMKOWICZ, "Determining the Burgers vectors and elastic strain energies of interface dislocation arrays using anisotropic elasticity theory", *Acta Materialia*, **61**, p. 5172-5187 (2013).
- [2] A. VATTRÉ, T. JOURDAN, H. DING, M.-C. MARINICA, M. J. DEMKOWICZ, "Non-random walk diffusion enhances the sink strength of semicoherent interfaces", *Nature Comm.*, **7**, 10424 (2016).