

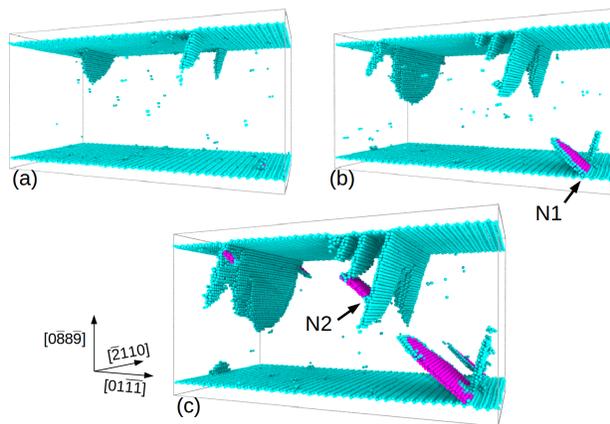
Initiation de la plasticité dans le zirconium en relation avec la formation d'hydrures

W. Szewc¹, S. Brochard¹, E. Clouet² & L. Pizzagalli¹

¹ Institut P', CNRS UPR 3346, Université de Poitiers, France

² Service de Recherches de Métallurgie Physique, CEA, DEN, F-91191 Gif-sur-Yvette, France

Le zirconium, un matériau de structure hexagonale, est important dans le domaine nucléaire car il est souvent utilisé pour les gaines de combustible. En conditions d'utilisation, il peut y avoir formation de précipités d'hydrure de zirconium Zr-H. Ces derniers, fragiles, sont une source de dégradation des propriétés mécaniques du matériau. Ceci se traduit également par une expansion en volume et la formation de contraintes au sein de la matrice de Zr. Les observations disponibles montrent que ces contraintes peuvent induire la nucléation de dislocations dans le zirconium à partir de l'interface Zr/Zr-H. Toutefois, ces observations sont très limitées, et ne permettent pas de déterminer la limite d'élasticité ni les mécanismes de nucléation des dislocations. D'un point de vue plus général, il existe également très peu d'études concernant l'initiation de la plasticité dans le zirconium.



Nucléation de dislocations partielles dans les plans pyramidaux (cyan), puis dans les plans de base (magenta).

Nous avons donc effectué des simulations de dynamique moléculaire d'une surface de zirconium sous contrainte, en utilisant deux potentiels interatomiques différents. Plusieurs modes de chargement ont été considérés, afin de reproduire l'action du précipité hydrure. Ces simulations révèlent que l'initiation de la plasticité est contrôlée par la nucléation hétérogène de dislocations partielles dans les plans pyramidaux de première espèce, suivie immédiatement par la formation de dislocations partielles dans le plan de base. L'analyse des γ -surfaces suggère que l'activation des plans pyramidaux est associée à un effet de nucléation en surface. La non-activation du glissement dans le plan prismatique, lequel domine généralement la plasticité dans le système massif, s'explique quant à elle par les conditions de chargement imposées par le précipité. La limite d'élasticité dépend des caractéristiques de la surface. Par exemple, elle diminue en présence de défauts comme des marches. Enfin, les valeurs calculées sont compatibles avec les déformations associées à la formation des précipités.