

Des débris de cascades de déplacements aux  
populations de défauts dans les matériaux irradiés:  
difficultés du changement d'échelles.

Thomas Jourdan et Jean-Paul Crocombette

CEA Saclay, DEN-SRMP, France



## Theoretical approach

- **Statistical physics**  
(driven or far from equilibrium systems)
- **Solid state physics**  
(electronic structure)
- **Dislocation theory**

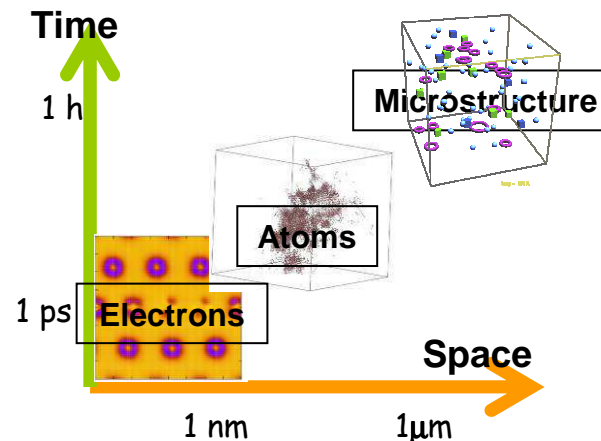
$$J_B = L_{BB}^{(0)} (f_{BB} + f_{BA}^{(B)}) \nabla \mu_V$$

$$\Sigma = iGW\tilde{T}$$

$$\tau_c = \left( \frac{c^2 v f_m^4}{b^3 s^2 \Gamma_s} \right)^{1/3}$$

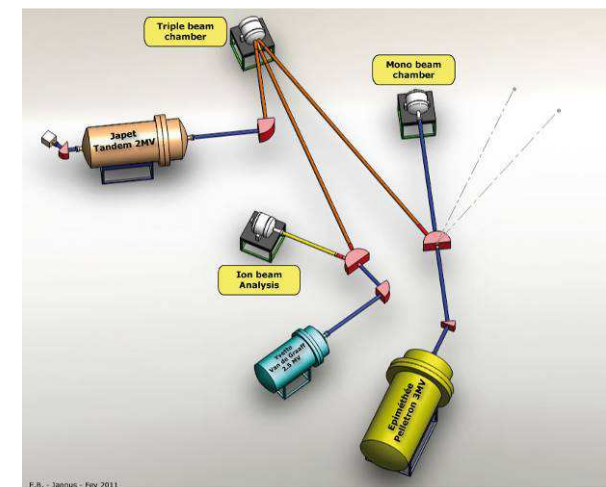
## Multiscale numerical simulations

- **Ab initio calculations of defects properties**
- **Molecular dynamics of out of equilibrium situations** (irradiation, plasticity, thermal transport)
- **Kinetics at the solid state** (Kinetic Monte-Carlo, rate equations)



## Experiments

- **JANNUS** : triple ion-beam irradiation facility,
- **Ball milling synthesis**  
(ODS steels)
- **Microscopes** (TEM, SEM)
- **Nano-indentation**

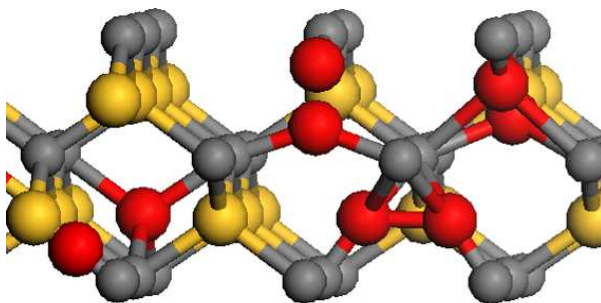


## Effects of irradiation:

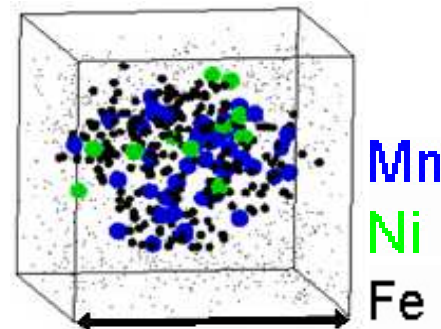
- Formation of point defects and clusters
- Precipitation / Dissolution, Patterning
- Irradiation induced segregation
- Phase transformation
  - Order/disorder
  - Amorphisation
- Dislocations
  - Glide
  - Climb

## Materials under study:

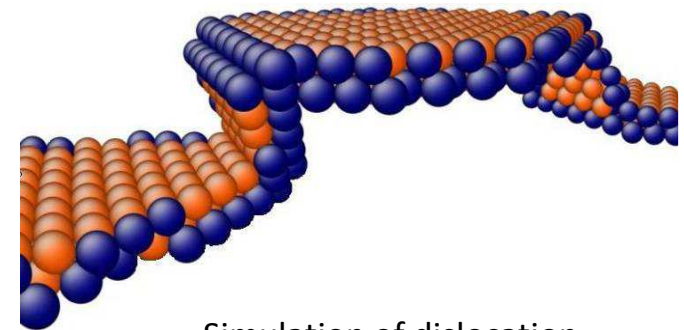
- Metals : BCC (Fe, W), HCP (Zr)
- Model alloys
- ODS steels
- $\text{UO}_2$
- SiC
- Model oxides



$I_{\text{Cent}}$   $I_{\text{TC}}$   $I_{\text{Sisp}\langle 100 \rangle}$   $I_{\text{Sisp}\langle 110 \rangle}$   $I_{\text{Sisp}\langle 111 \rangle}$   
Si interstitials in SiC

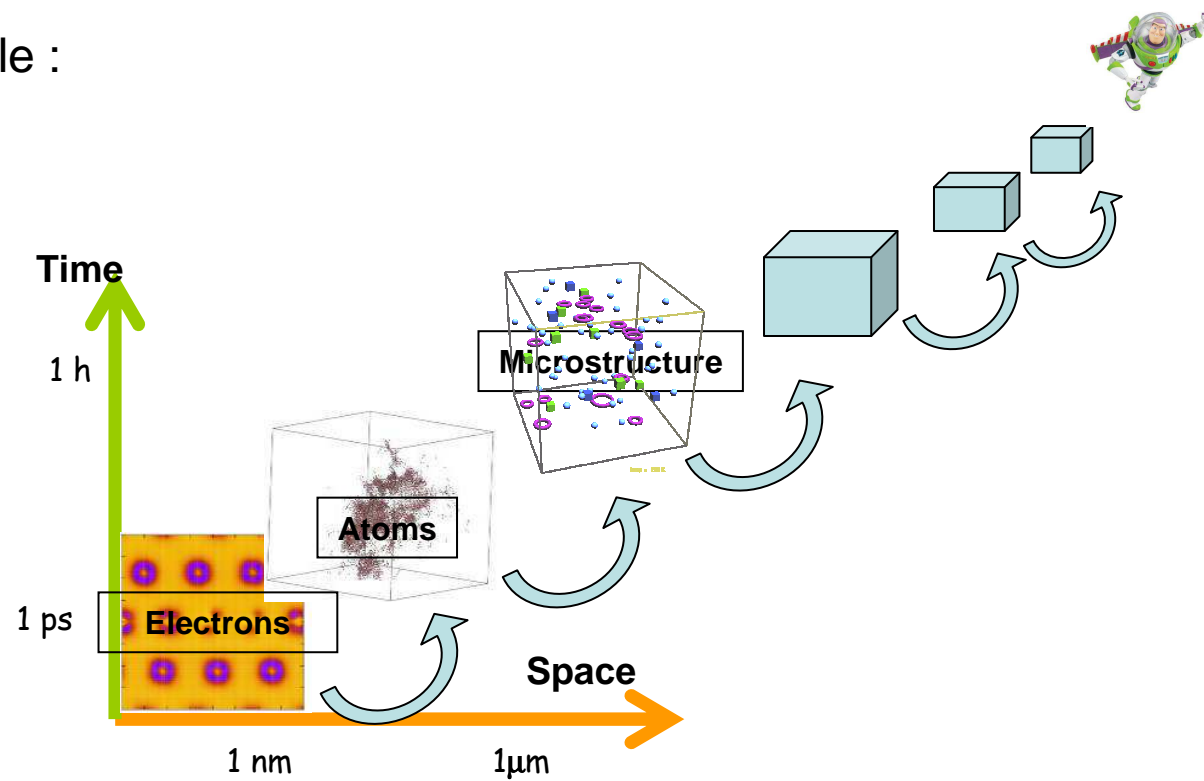


3 nm  
3D atom probe Mn-Ni precipitates  
formed under irradiation



Simulation of dislocation  
climb

Image trop simple :



Exemple de véritable couplage multi-échelle pour la cinétique des défauts d'irradiation

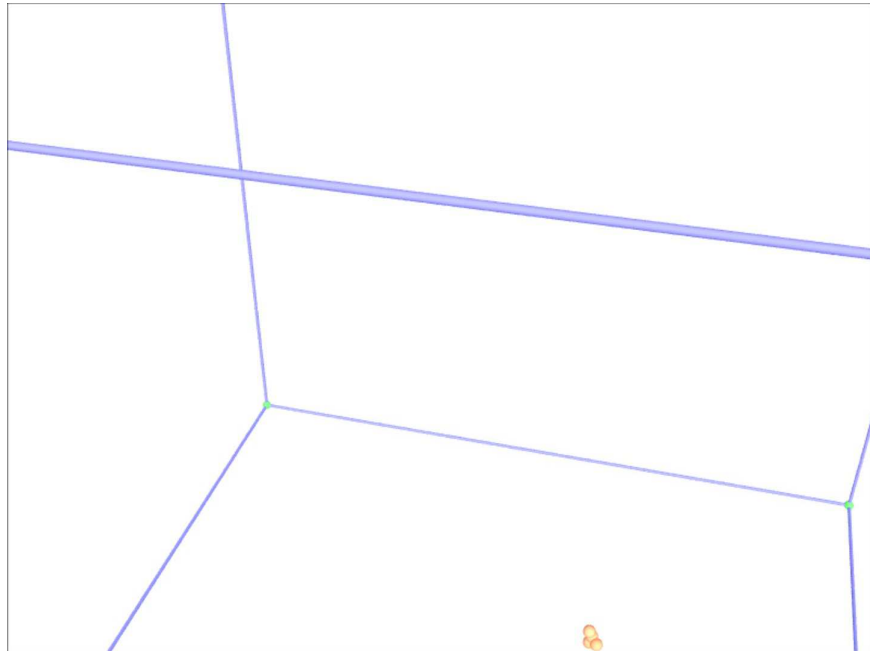
Des débris de cascades de déplacements aux populations de défauts

# Evènements élémentaires : cascades de déplacements

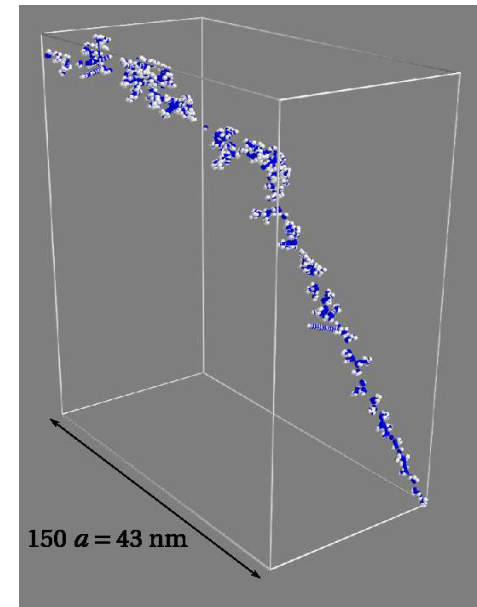
Série de chocs balistiques : « dommage primaire » = 10p.s./10 nm

Dynamique moléculaire

cascade de 20keV dans le fer



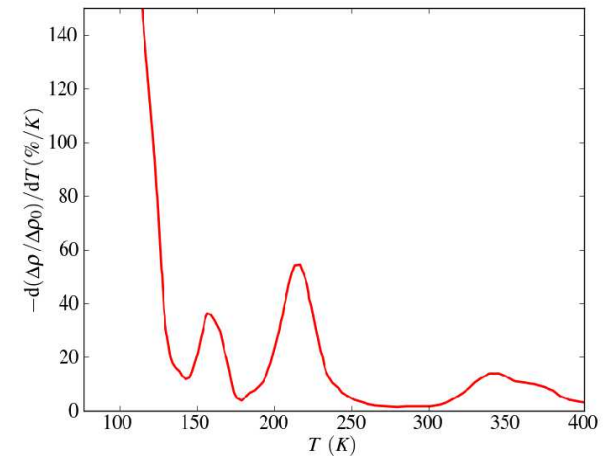
cascade de 100keV dans le fer



Expériences : mesures macroscopiques, temps longs

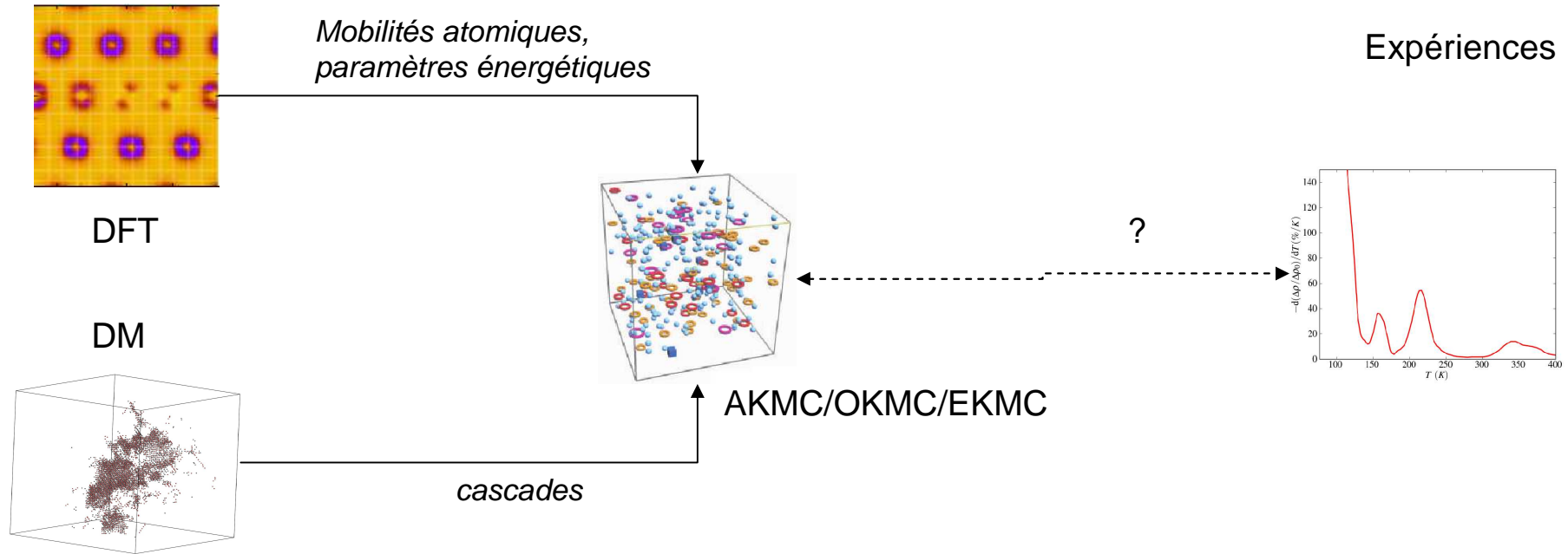
ex recuit isochrone de résistivité

électrique



Passage des évènements élémentaires aux grandes échelles

# Modélisations Monte-Carlo Cinétique (KMC)



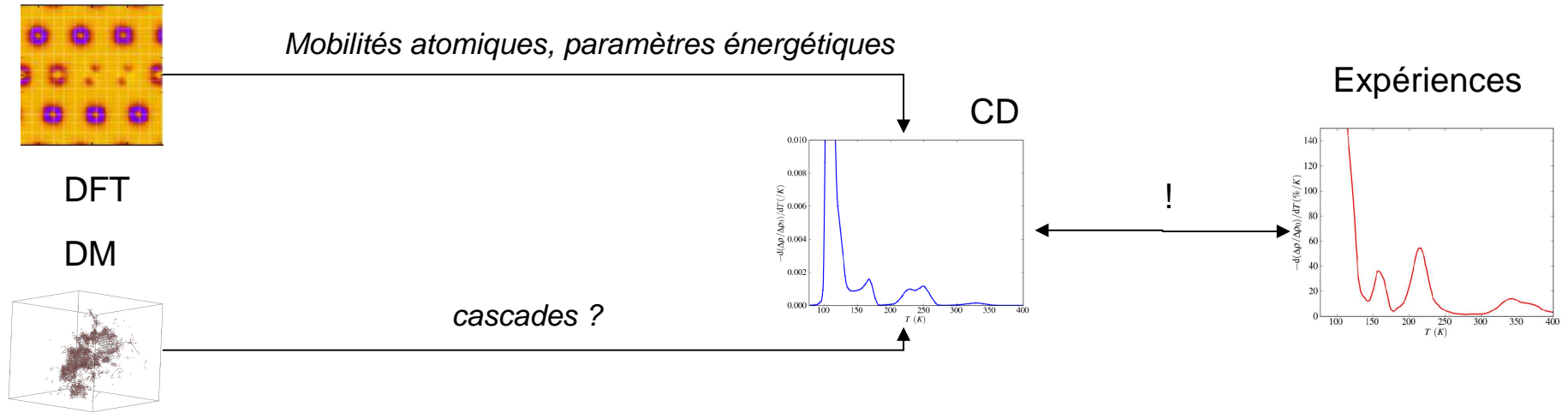
Monte-Carlo Atomique (AKMC), sur Objets (OKMC) ou sur Evènements (EKMC)

☺ : Couplage direct avec l'échelle atomique

☹ : peu d'atomes/d'objets/d'évènements → Faibles doses, < 0.1 dpa (déplacement par atome)

☹ : petites tailles : 10nm pour AKMC, 1μm pour OKMC/EKMC

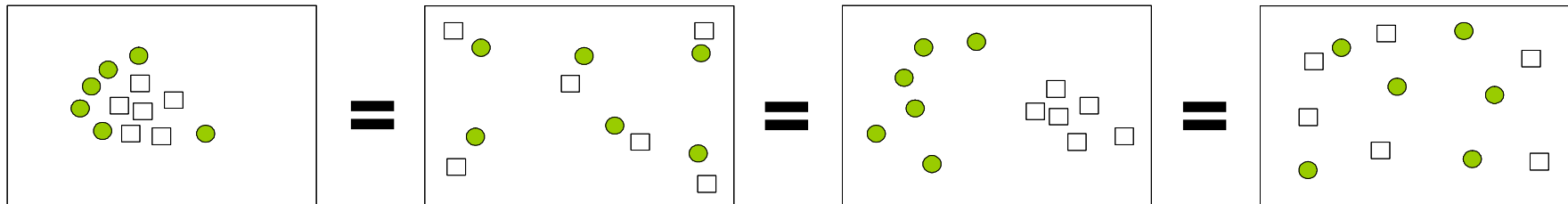
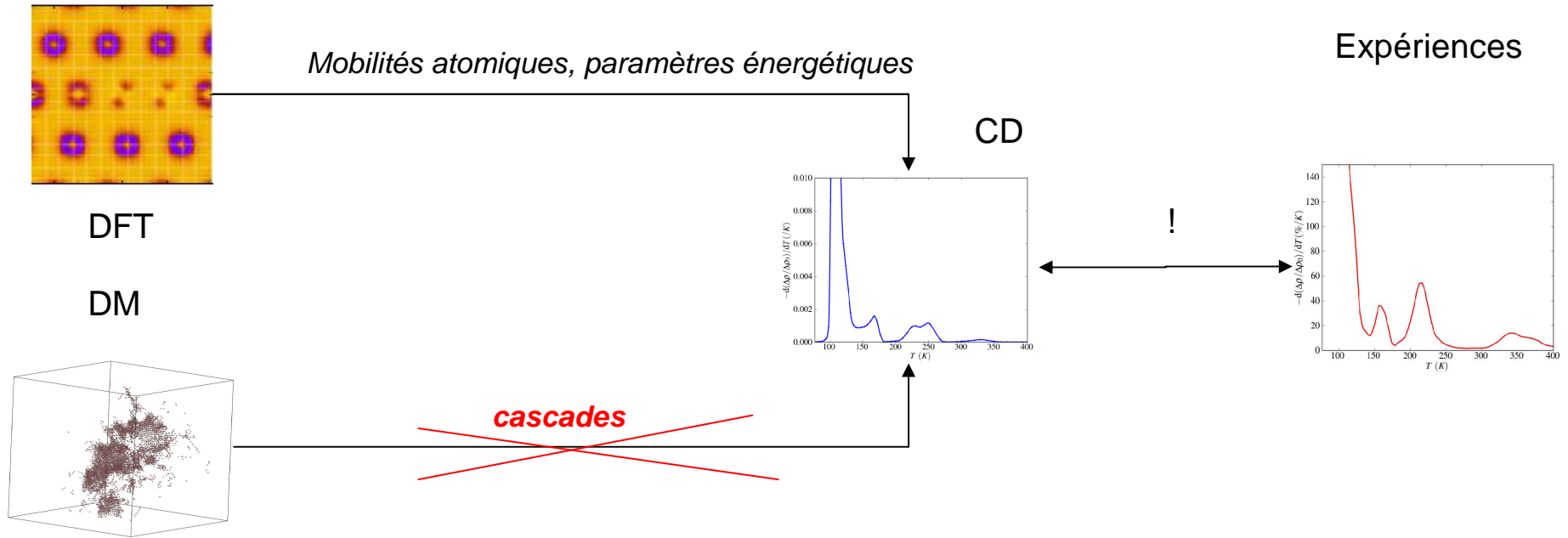
# Dynamique d'Amas (Cluster Dynamics, CCH, rate eq.)



Evolution des concentrations d'amas de défauts: cavités, bulles, boucles interstitielles, etc..

$$\frac{\partial C_{v,z}}{\partial t} = \underbrace{G_{v,z}}_{\substack{\text{irradiation} \\ \text{terme source} \\ \text{cascades}}} - \underbrace{\sum_{\mu} J_{v,\mu}}_{\text{réactions}} - \underbrace{k_{v,z} D_{v,z} (C_{v,z} - C_{v,z}^0)}_{\text{éliminations aux puits}}$$

☺ : fortes doses (~100dpa), temps longs, ☺ : grandes tailles ☺ : mêmes échelles qu'expérience  
 ☹ : concentrations moyennes ☹ : **terme source, productions de défauts uniformes**





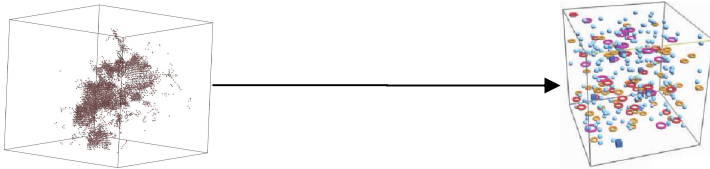
# terme source d'irradiation en dynamique d'amas

Transfert direct du dommage primaire issu de la dynamique moléculaire (cascades)

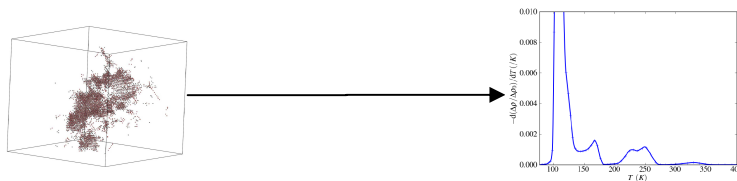
Exemples : accumulation de cascades de 20 keV dans le fer (dose  $10^{-3}$  dpa, flux  $10^{-4}$  dpa.s $^{-1}$ )

2 calculs :

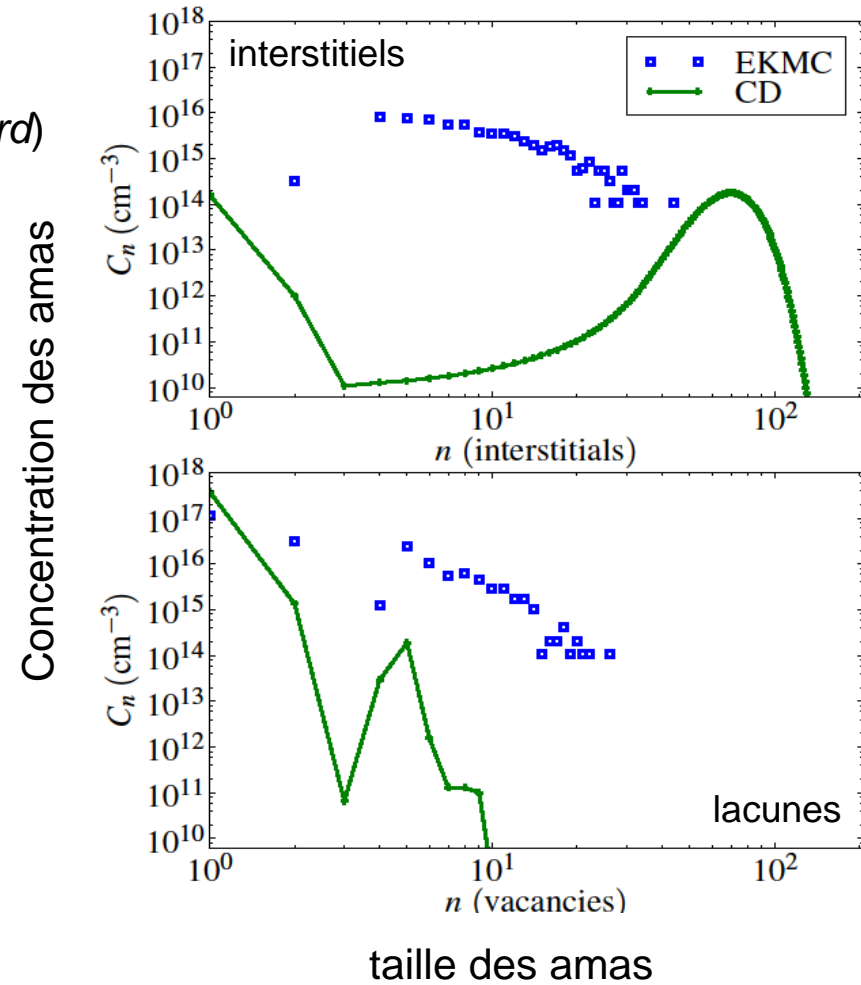
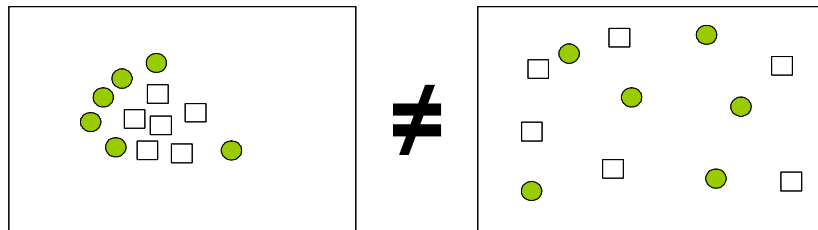
DM vers EKMC : calcul de référence (*très lourd*)



DM vers dynamique d'amas (CD)



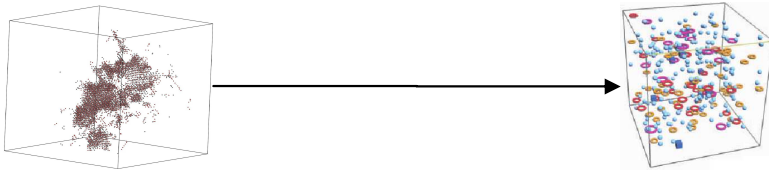
Homogénéisation artificielle:



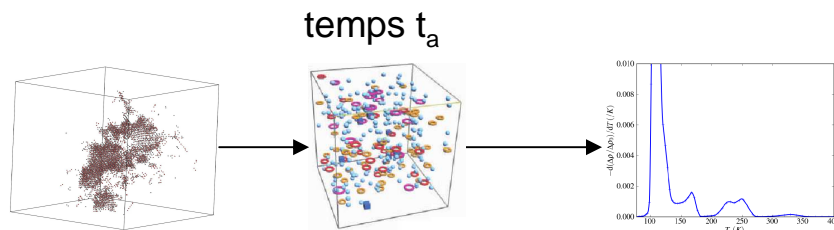
# tentative de recuit des cascades par KMC standard

Recuit des cascades en **KMC** pendant un **temps donné** ( $t_a$ )

DM vers EKMC : **calcul de référence** (*très lourd*)



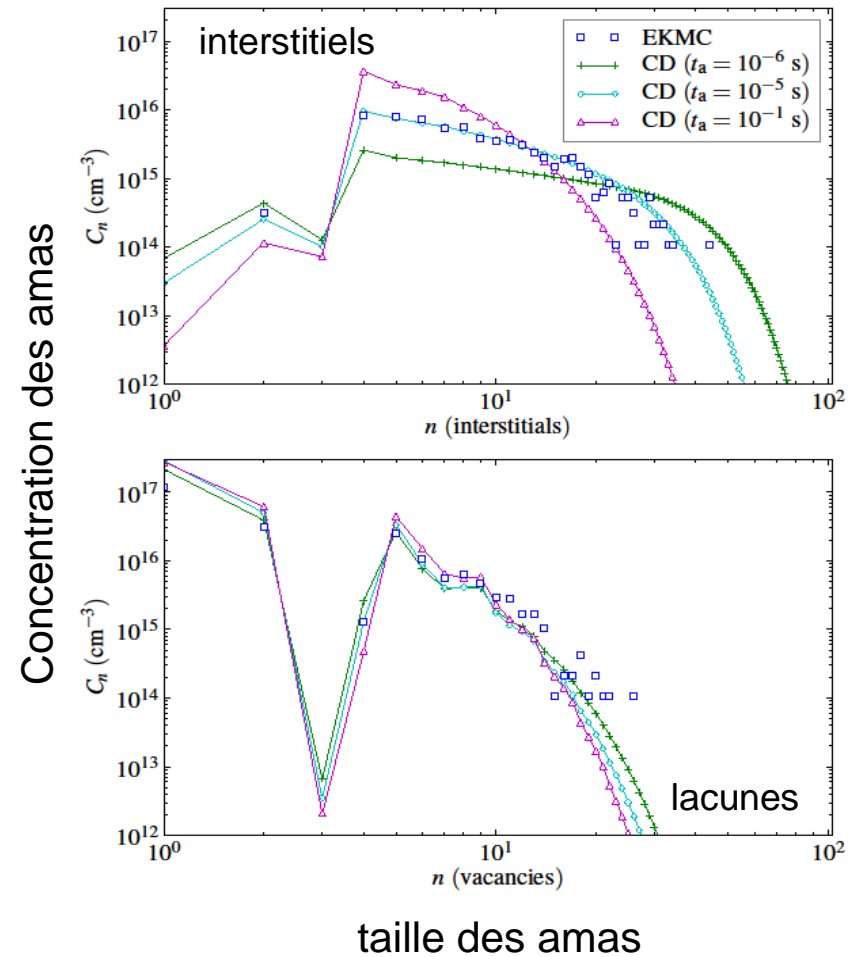
DM vers EKMC vers dynamique d'amas (CD)



Choix du temps  $t_a$  ? Impossible d'avoir un bon accord pour les lacunes **et** les interstitiels.

La diffusion des interstitiels est plus rapide que celle des lacunes

→ pas de temps de recuit caractéristique



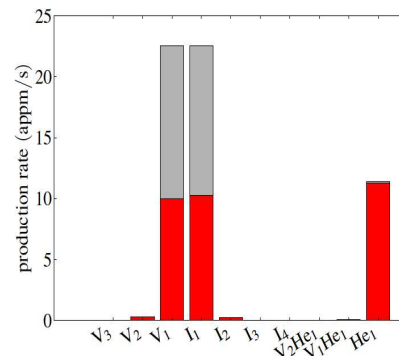
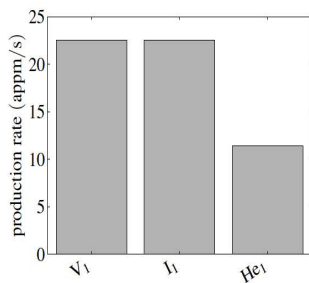
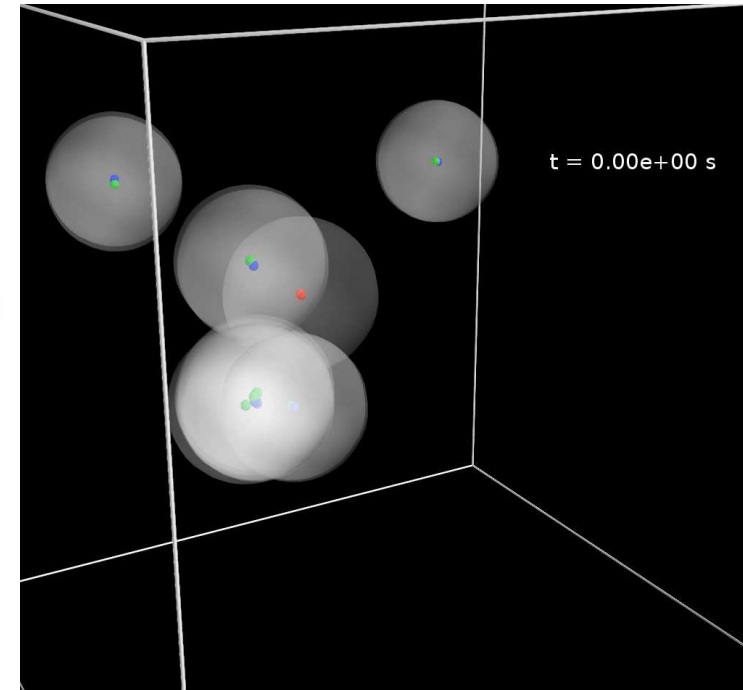
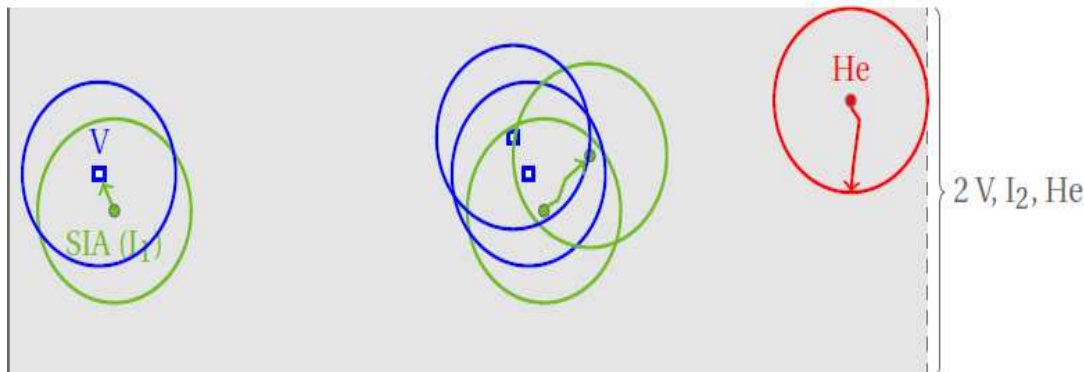
# Homogénéisation par les sphères : principe

Recuit des cascades avec un **KMC modifié** : **SHKMC** (Sphere Homogenization KMC)

Sphère autour de chaque défaut, KMC pour la diffusion dans la sphere

Combinaison ou sortie de la sphere

Exemple implantation d'helium

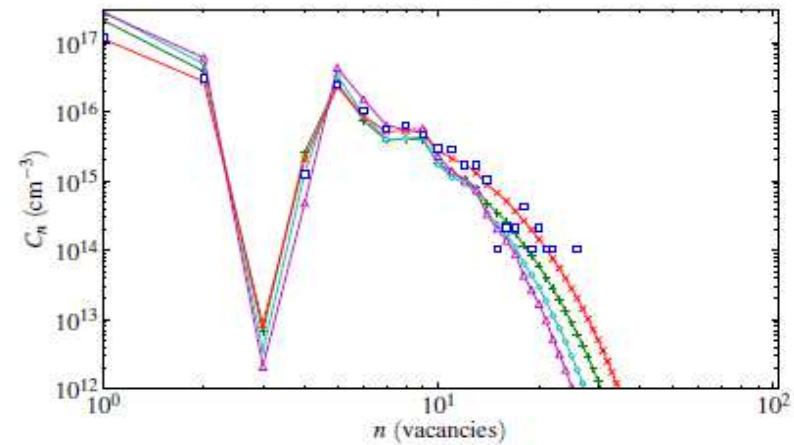
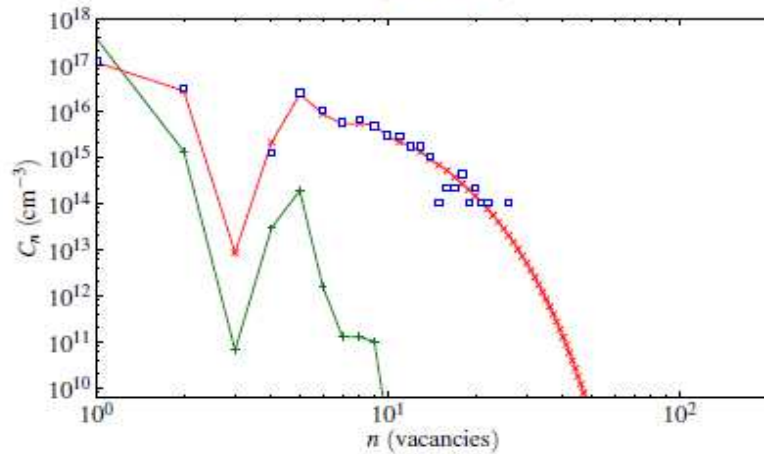
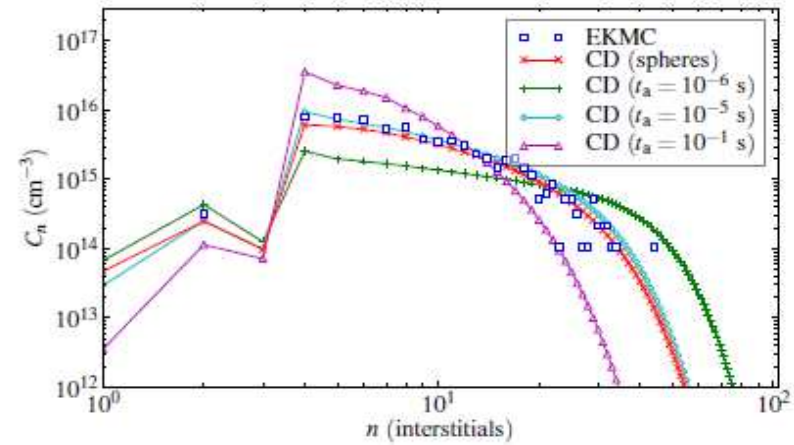
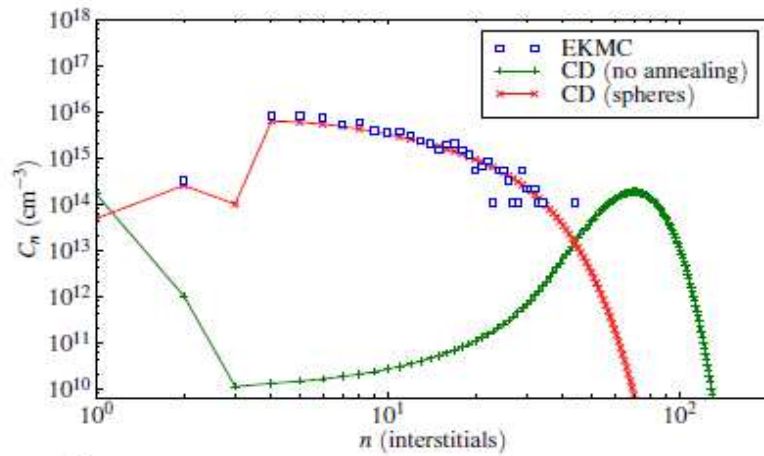


Terme d'irradiation effectif qui ne correspond à aucun temps de vieillissement réel

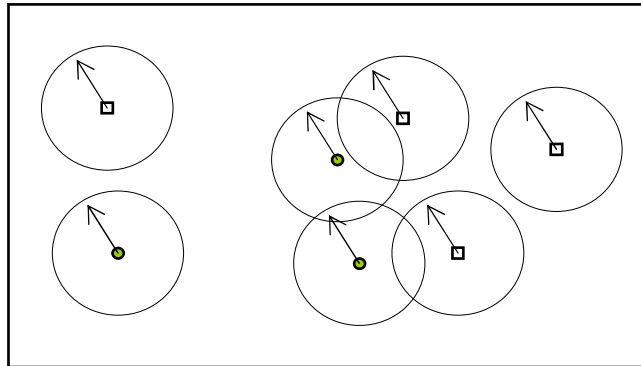
Distance de d'homogénéisation plutôt que temps de vieillissement

# Homogénéisation par les sphères : résultats

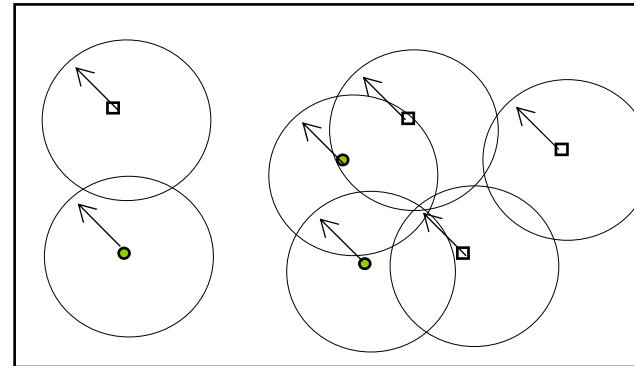
Exemples : accumulation de cascades de 20 keV dans le fer (dose  $10^{-3}$  dpa, flux  $10^{-4}$  dpa.s $^{-1}$ )



Terme d'irradiation effectif : dépend du rayon



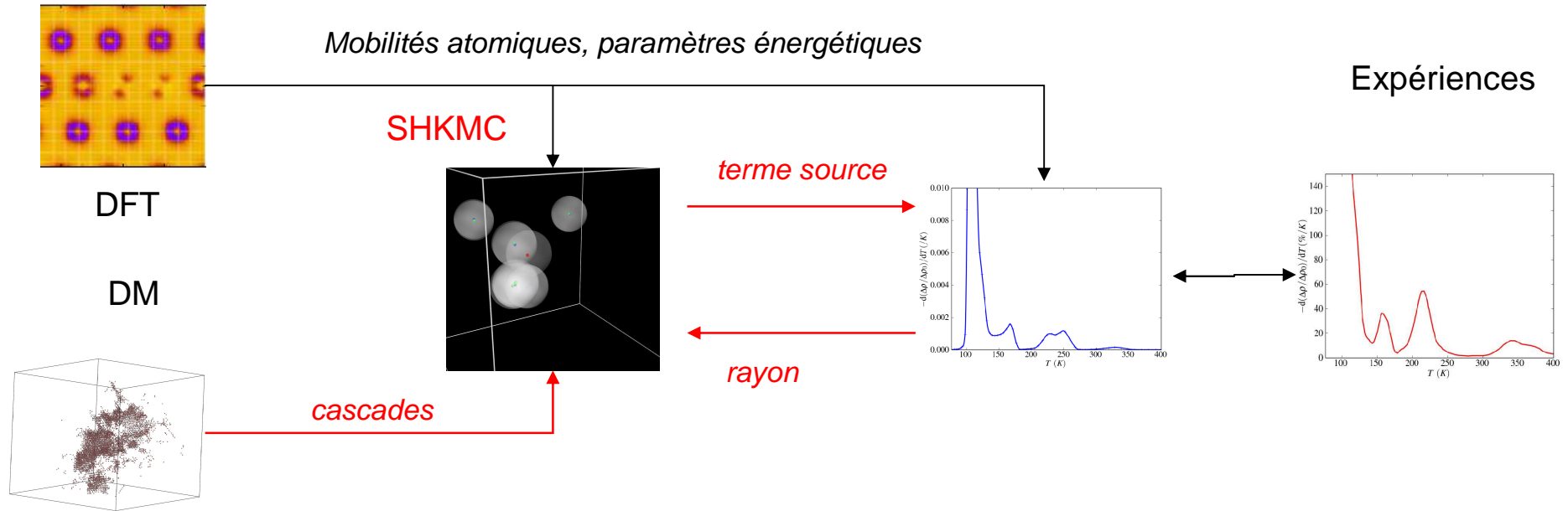
**V.S.**



Rayon optimal égal à la distance moyenne entre défauts dans la dynamique d'amas

- Séries de calculs à différents rayons
- Aller et retours entre SHKMC et dynamique d'amas

$$r_d = \frac{1}{2} \left( \frac{1}{\sum_{\nu} C_{\nu}} \right)^{1/3}$$



SHKMC Méthode ad hoc de couplage entre échelle atomique et dynamique d'amas  
Nécessité d'aller et retours entre SHKMC et dynamique d'amas

Voir : “rate theory cluster dynamics simulations including spatial correlations within displacement cascades”, Jourdan, T.; Crocombette, J. P., Physical Review B 86, 054113