

---

# Simulations atomistiques de la propagation des fissures de fatigue sous environnement inerte

Eyouiléki Awi<sup>\*1,2,3</sup>, Maxime Sauzay<sup>†1</sup>, Laurent Van Brutzel<sup>2</sup>, Olivier Hardouin Duparc<sup>4</sup>,  
and Zhengxuan Fan<sup>5</sup>

<sup>1</sup>DEN/DMN/SRMA – Commissariat à l’Energie Atomique et aux Energies Alternatives (CEA) - Saclay  
– France

<sup>2</sup>DEN/DPC/SCCME – Commissariat à l’Energie Atomique et aux Energies Alternatives (CEA) -  
Saclay – France

<sup>3</sup>Sorbonne Université, Institut de Formation Doctorale – Sorbonne Université UPMC Paris VI – France

<sup>4</sup>Laboratoire des Solides Irradiés (LSI) – Ecole Polytechnique Université Paris Saclay – 91128 Palaiseau  
Cedex, France, France

<sup>5</sup>Laboratoire des Solides Irradiés (LSI) – Ecole Polytechnique, Université Paris Saclay, Ecole  
Polytechnique Université Paris Saclay – France

## Résumé

L’étude de la fatigue à grand nombre de cycles a pour objectif, la prédiction de l’initiation et de la propagation des fissures pour des structures soumises à des sollicitations de faibles niveaux de contrainte. L’enjeu principal est la compréhension des mécanismes physiques de déformation et leur conséquence en termes d’initiation et de propagation des fissures. Bien qu’ils aient fait l’objet de très nombreuses études expérimentales et théoriques depuis les années cinquante, les mécanismes exacts de l’initiation des microfissures et de la propagation de micro- et macro- fissures demeurent en grande partie mal compris. En effet, certains mécanismes se déroulent à l’échelle atomique ce qui rend l’observation expérimentale, la compréhension et la modélisation délicates, malgré le nombre important de modèles proposés dans la littérature (Suresh, 1998; Fan et al, 2017).

Dans ce travail, nous tentons d’analyser à l’échelle atomique les mécanismes d’initiation et de propagation des fissures de fatigue dans les métaux à structure cubique à face centrée (Ni, Cu), par simulation de dynamique moléculaire, qui est un outil pertinent dans la description des phénomènes observés à l’échelle atomique en surface (Fan et al, 2016, 2017), et en pointe de fissure (Nishimura et al, 2004 ; Horstemeyer et al, 2010; Fan et al. 2016). D’après nos simulations de la déformation de cristaux orientés pour un glissement multiple, sous sollicitation de mode I, l’émission de dislocations depuis la pointe de fissure a lieu sur plusieurs systèmes de glissement. La densité locale de dislocations émises en pointe de fissure est fonction de l’orientation cristalline. Le glissement multiple engendré, induit des interactions entre les nombreuses dislocations émises. Ces interactions conduisent à la formation des verrous et de dislocations non glissiles (comme les verrous de Hirth ou Lomer-Cottrell). Des enchevêtrements se forment. Lors de la décharge, ils empêchent le glissement réversible total des dislocations vers la pointe de fissure d’où elles ont été émises durant le demi-cycle de

---

\*Intervenant

†Auteur correspondant: maxime.sauzay@yahoo.fr

charge. Ainsi, une irréversibilité plastique en pointe de fissure est observée et peut conduire à une avancée de la pointe de fissure de l'ordre de quelques distances interatomiques pour de faibles valeurs du facteur d'intensité des contraintes et pour un rapport de charge nul.

**Mots-Clés:** Fissure, Fatigue, dislocations, dynamique moléculaire