



## DIPLÔME NATIONAL DE DOCTORAT

(Arrêté du 25 mai 2016)

Date de la soutenance : **28 novembre 2022**

Nom de famille et prénom de l'auteur : **Madame GAUDET Marion**

Titre de la thèse : « *Modélisation multi-échelle de la plasticité de UO<sub>2</sub> sous influence des défauts d'irradiation* »

### Résumé



Le dioxyde d'uranium (UO<sub>2</sub>) est le principal combustible nucléaire utilisé dans les réacteurs à eau pressurisée. La compréhension de son comportement mécanique est d'un intérêt majeur pour la sûreté nucléaire. Dans des conditions de fonctionnement accidentelles, la température augmente considérablement ( $T > 1900\text{K}$ ) et favorise la déformation par fluage, qui doit être prise en compte dans l'évaluation de l'intégrité du combustible. Les pastilles de combustible UO<sub>2</sub> sont alors soumises à des changements microstructuraux dus à des défauts induits par l'irradiation tels que les boucles de dislocation prismatiques générées par l'accumulation d'atomes interstitiels pouvant influencer le comportement viscoplastique des pastilles.

Le premier objectif de ce travail de thèse est d'étudier les cœurs et la mobilité des dislocations dans les systèmes  $1/2\langle 110 \rangle\{100\}$ , le mode de glissement principal de UO<sub>2</sub>. Tout d'abord, les différents cœurs (neutres et chargés) de la dislocation coin sont étudiés par statique moléculaire à l'aide d'un potentiel interatomique classique. Plusieurs structures de cœurs stables sont identifiées, dont le cœur neutre asymétrique d'Ashbee. Néanmoins, cette structure de cœur n'est pas stable en température, où une configuration en « zig-zag » apparaît. Cette structure est davantage étudiée avec le même potentiel, ainsi qu'avec un potentiel à charges variables et des calculs DFT sont réalisés au CEA de Cadarache. La mobilité de la dislocation coin dans  $1/2\langle 110 \rangle\{100\}$  est ensuite étudiée à différentes températures et contraintes, grâce à des simulations de dynamique moléculaire, les régimes athermique et thermiquement activé sont identifiés et une température de transition athermique est estimée.

Par la suite nous examinons comment les dislocations mobiles  $1/2\langle 110 \rangle\{100\}$  interagissent avec les boucles prismatiques  $1/2\langle 110 \rangle\{110\}$  dans le but de construire un cadre de plasticité cristalline pour UO<sub>2</sub>. Tout d'abord, des simulations de dynamique moléculaire sont réalisées pour caractériser les réactions de contact local entre les dislocations  $1/2\langle 110 \rangle\{100\}$  glissiles et diverses configurations de

## RÉSUMÉ

boucles prismatiques  $\{110\}$  à 2000 K sous une contrainte de cisaillement constante. Une attention particulière est accordée à l'influence de la taille d'une boucle d'irradiation sur la réaction. En parallèle, des simulations de dynamique des dislocations discrètes (DDD), informées par la DM, sont effectuées afin de vérifier la reproductibilité des résultats atomistiques en utilisant la théorie élastique. Alors que certaines réactions des dislocations présentent des similitudes avec des observations courantes dans les métaux, des configurations originales apparaissent également, nécessitant un traitement spécifique dans la DDD.

Pour finir, des simulations massives sont réalisées en DDD pour quantifier le durcissement induit par une population statistique de boucles d'irradiation dont la densité est ajustée sur les expériences. Les réactions locales de contact sont étudiées et le durcissement induit par l'irradiation est comparé à d'autres contributions au renforcement de  $\text{UO}_2$ , comme par exemple le durcissement de la forêt.