

Conclusion



Les matériaux du nucléaire : quelques éléments de perspective

Cette monographie sur les matériaux du nucléaire présente une variété d'approches et de problèmes caractéristique du rôle des matériaux dans la plupart des domaines industriels : les matériaux rendent les choses possibles ou demeurent un obstacle insurmontable. On ne compte plus les « conceptions sur papier » qui sont de belles constructions de l'esprit et ne dépassent pas le stade de la question apparemment simple de « en quel matériau réalise-t-on l'objet ? », et celle encore plus fréquemment oubliée de « comment le fabrique-t-on ? ». Cette préoccupation, qui doit être au cœur de la conception des objets industriels, devient encore plus indispensable quand leur vieillissement est une préoccupation majeure. C'est le cas, en particulier, dans le domaine du nucléaire.

Mais l'environnement nucléaire, en raison notamment de l'irradiation, présente des spécificités supplémentaires qui le rendent très particulier dans le champ immense de la science des matériaux. La sollicitation par l'irradiation met en péril les caractéristiques constitutives mêmes des matériaux :

- L'irradiation peut conduire à une évolution de la chimie, soit globale par transmutation de certains éléments, soit locale par ségrégations induites ;
- l'irradiation provoque un désordre structural dans les constructions cristallines par la création de nombreux défauts ponctuels qui peuvent s'agglomérer en une population de boucles de dislocations. Ce désordre structural peut parfois aller jusqu'à l'amorphisation ;
- enfin, l'irradiation, en forçant les atomes à se placer hors de leurs sites d'équilibre, et en créant un excès de défauts ponctuels, conduit à un transport accéléré, et modifie la façon dont le système sous irradiation explore l'espace des phases.

Ces trois perturbations majeures des caractéristiques des matériaux solides, provoquées par l'irradiation, sont à la racine de la variété des phénomènes observés. Comme le disait Georges MARTIN, qui a beaucoup œuvré pour la compréhension des matériaux du nucléaire : « Sous irradiation tout peut arriver... mais pas n'importe quoi ! ».

Par cette description à grands traits de l'évolution des matériaux sous irradiation, on comprend que le domaine de la métallurgie nucléaire a été pionnier dans la question centrale du changement d'échelle. D'abord un changement d'échelle d'espace, puisque, si le dommage est bien au niveau ato-

mique, par contre la compréhension quantitative des conséquences au niveau macroscopique passe par une analyse fine du comportement collectif aux échelles intermédiaires, à savoir celles des dislocations, des grains, et des agrégats polycristallins. Mais aussi changement d'échelle de temps, puisque l'un des objectifs de cette compréhension est la prédiction de l'évolution dans le temps des propriétés des matériaux d'un réacteur nucléaire. Tout naturellement, la métallurgie nucléaire est aux avant-postes de la simulation multi-échelles.

Se posent alors immédiatement les questions qui renvoient à la fiabilité des modèles : comment décrire les interactions entre atomes ? Comment analyser les conditions de glissement des dislocations et leurs interactions avec les autres défauts ? Comment comprendre le passage d'un essai Charpy à un essai de ténacité ? Comment introduire au niveau de fiabilité suffisant les mécanismes de transport hors et sous irradiation ?

Il y a, dans cette monographie, quelques exemples de beaux succès de la modélisation multi-échelles. Mais il faut résister à la tentation de la « survendre ». Nombre de « briques élémentaires » sont encore manquantes. La chimie est traitée de façon très fruste avec des modélisations qui vont rarement au-delà des alliages binaires, sauf à s'appuyer sur une phénoménologie moins bien contrôlée. Les interfaces (joints de grains, interphases) sont prises en compte de façon très rustique, alors qu'elles jouent un rôle essentiel dans nombre de problèmes de fragilisation. La relation admise entre la ténacité et le durcissement fait un peu rapidement l'impasse sur la contribution de l'écrouissage. Les ségrégations chimiques sous irradiation peuvent être rationalisées, mais on est loin de pouvoir les prédire. Par ailleurs, la modélisation de phénomènes majeurs comme le fluage sous irradiation ou la corrosion sous contrainte, pour ne rien dire de la corrosion assistée par irradiation, sont en friche. Des efforts louables sont faits pour importer vers le combustible les concepts développés pour les matériaux métalliques ; cependant, les spécificités de l'irradiation des solides ioniques conduisant à des défauts ponctuels chargés doivent être prises en compte. Enfin, si la « mécanique locale de la rupture » donne un cadre pertinent à l'étude des comportements post-irradiation, son application sous irradiation et la prédiction à partir de la microstructure des grandeurs des modèles macroscopiques, restent à faire. À égrener les questions encore ouvertes, on peut passer du triomphalisme au découragement ; pourtant, les progrès faits

dans la décennie écoulée, que ce volume vient illustrer, sont impressionnants et encourageants aussi.

L'expérimentation dans le domaine des matériaux en environnement nucléaire est coûteuse et lourde à mettre en œuvre. Les outils d'irradiation aux ions ou aux électrons permettent de disposer d'un environnement beaucoup moins contraignant que lors de l'irradiation aux neutrons. La nécessité de devoir travailler sur des faibles quantités de matière conduit à considérer des dispositifs spéciaux (éprouvettes à noyaux gonflants, micromachines, nanoindentation). La tentation demeure toutefois de substituer à ces expériences difficiles des simulations numériques. Il faut absolument résister à cette tentation perverse ! Quelque subtile et raffinée que soit une modélisation numérique, le juge de paix demeure la comparaison avec l'expérience, et la mère nourricière est l'ensemble d'expériences qui permet de fournir aux modèles les paramètres pertinents et leur valeur numérique. Une règle de bonne conduite – à recommander autant que faire se peut – est de résister à la tentation de pousser trop rapidement à une comparaison complaisante entre la simulation et l'expérience. La figure suivante décrit la démarche intellectuelle pour le traitement de systèmes complexes, permettant d'appliquer à des systèmes complexes des simulations numériques développées et validées sur des systèmes plus simples. Les simulations numériques sont généralement développées sur des systèmes beaucoup plus simples. Par exemple, la simulation de la plasticité des métaux par un code 3D de simulation dyna-

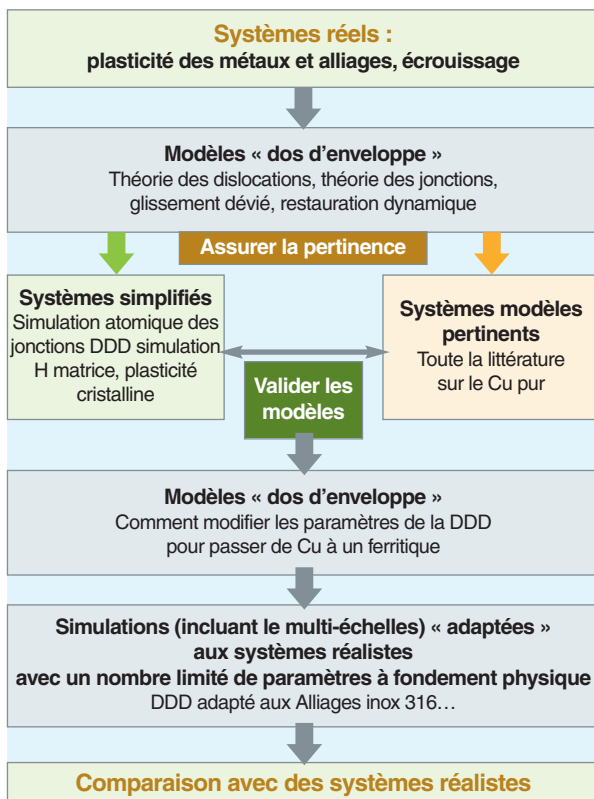
mique des dislocations est calibrée sur un matériau modèle tel que le cuivre. Il faut donc par des calculs de « dos d'enveloppe » déterminer pour l'alliage 316 la valeur des paramètres, comme, par exemple, ceux contrôlant le glissement dévié ou l'instabilité des dipôles « coin ». Une fois cette « re-calibration » effectuée, il devient possible de procéder à l'étape de comparaison directe, mais il n'est pas possible de le faire avant. Ce que nous venons de décrire pour la plasticité des alliages 316 irradiés est une démarche générique : pour comprendre les cinétiques de décomposition, en traitement thermique ou bien sous irradiation, il faut d'abord considérer un système « modèle » qui n'est autre qu'un alliage binaire A-B dans lequel on introduira progressivement la complexité à l'aide de paramètres d'interaction pour décrire les effets du magnétisme sur la distorsion du diagramme de phase.

Dans le cas décliné ci-dessus, l'essentiel de la physique est connu, et résister à la tentation d'une comparaison trop rapide entre la simulation et le corpus expérimental motivant la simulation ne nécessite pas un héroïsme excessif : les outils conceptuels existent pour « adapter » la simulation, validée sur une situation simple, à une situation plus complexe.

Si l'on envisage, au contraire, des situations comme la corrosion sous contrainte assistée par l'irradiation, ou le frottement, ou le fluage par irradiation, les mécanismes de base ne sont pas clairement identifiés. Dans ces cas, utiliser sans précaution de la « simulation multi-échelles » serait aussi judicieux que de construire un mur avec des briques mal cuites. Il apparaît ainsi de façon claire le rôle essentiel des matériaux « modèles » dans une démarche de validation expérimentale de la modélisation multi-échelles : de tels matériaux permettent de comparer une simulation nécessairement simplificatrice, avec des résultats expérimentaux obtenus sur un matériau pour lequel ces simplifications sont acceptables : on est alors assuré de la robustesse de la simulation, et l'étape d'adaptation peut avoir lieu. D'où il ressort deux règles fondamentales rendues indispensables par la complexité intrinsèque des sollicitations sous irradiation :

- Identifier les mécanismes élémentaires et leur description, par voie analytique ou par voie de simulation, sur des matériaux modèles choisis pour comprendre ;
- valider les simulations numériques, et en particulier les simulations multi-échelles où la propagation d'erreur est un aspect fondamental à prendre en compte, sur des matériaux ayant un degré de complexité comparable à celui des simulations.

Après avoir pris soin d'éviter la confusion entre la qualification d'un matériau et la compréhension d'un phénomène, et résisté à la tentation de comparer trop rapidement les résultats d'une simulation avec la situation qui motive la recherche, on gagnera du temps, en commençant par en prendre pour disposer de bases solides à l'aide d'expériences, et en particu-



lier d'expériences d'irradiation bien choisies. C'est le prix à payer pour que les simulations numériques puissent véritablement conduire à une estimation fiable du vieillissement des composants, ou servir de guide pour développer les matériaux de la 4^e génération de réacteurs.

Ces précautions prises, la liste des sujets présentés dans cette monographie est autant celle de « *success stories* ». Mais c'est aussi la liste de « zones d'ombre » passées en revue précédemment dans cet article. Cela ne doit conduire ni à un optimisme béat, ni à un découragement excessif, mais engager la nouvelle génération de scientifiques des matériaux du nucléaire à s'attaquer à ces problèmes avec enthousiasme ; la seule réaction raisonnable est celle de Raphaël devant les fresques de Michel-Ange : « Et moi aussi, je suis peintre ! ».

Yves BRECHET,

Haut-commissaire à l'énergie atomique



Glossaire – index

Les entrées du présent glossaire suivies du signe + sont des termes recommandés qui ont été publiés au *Journal officiel*, avec leur définition consultable sur le site www.franceterme.culture.fr

ab initio : se dit des calculs qui se fondent sur les premiers principes, sans paramètres ajustables. Le terme est particulièrement employé pour désigner des calculs visant à déterminer la structure et les propriétés des atomes, molécules ou matériaux directement à partir de la résolution de l'équation de Schrödinger. La **théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT)*** est aujourd'hui une des approches *ab initio* les plus courantes en chimie et en sciences des matériaux. Elle donne, par exemple, accès aux propriétés spectroscopiques, de transport et de cohésion des matériaux, quelle que soit la nature des liaisons entre les atomes (métallique, covalente ou ionique). **5, 18, 19, 25-27, 29-31, 33-37, 42, 44, 48-51, 57, 59, 63, 64, 117-119, 123, 125, 133, 134, 136, 137, 140, 141, 143-145, 153, 154, 157, 163-167, 190.**

Accélérateur : dispositif servant à communiquer, sous l'action d'un champ électrique, une énergie cinétique très élevée à des particules chargées. Dans le cas d'un accélérateur Van de Graaf, le champ accélérateur est électrostatique. **85, 90, 101, 112, 113.**

Accident par Perte de Réfrigérant Primaire (APRP) : accident hypothétique provoqué par une brèche dans le circuit primaire. L'existence de cette brèche entraîne une chute de la pression dans le circuit primaire et une perte de l'inventaire en eau de ce circuit, dont résulte un échauffement des crayons combustibles. **90, 186.**

Acier austénitique : acier constitué principalement d'atomes de fer et à structure cristalline cubique à faces centrées. **8, 10, 12, 14, 17, 77, 112, 113, 173.**

Adoucissement : évolution d'un matériau en cours de sollicitation, provoquée par une évolution de sa microstructure à la suite d'un vieillissement thermique ou d'une déformation. L'adoucissement est caractérisé par une diminution de la dureté et de la limite élastique, contrainte à partir de laquelle le matériau quitte le régime de déformation élastique réversible. L'adoucissement est l'opposé du **durcissement***. **71-73, 164, 165, 175-177, 191, 194.**

AIEA (Agence Internationale de l'Énergie Atomique) : organisme établi par les Nations Unies pour surveiller et encourager les utilisations pacifiques de l'énergie nucléaire. **105, 106.**

Amorphe : se dit d'un solide dont les atomes ne sont pas rangés de façon périodique et ordonnée comme dans un cristal, mais de façon anarchique. **16, 35, 40, 128, 129.**

Analyse thermique : le principe de l'analyse thermique est d'enregistrer la température d'un échantillon au chauffage ou au refroidissement, afin de détecter les températures auxquelles ont lieu des transformations structurales (transitions de phases). Si la mesure de température est comparée à celle d'une référence, on parle d'analyse thermique différentielle (**ATD**), sinon, on parle d'analyse thermique simple (**ATS**). **119, 120.**

Antisite : dans un matériau binaire ordonné et formé d'atomes A et B, on parle de défaut antisite AB quand un atome de type A prend la place d'un atome de type B. **133-136.**

Approche de second ordre : se dit d'un système régi par une équation différentielle du second ordre à coefficients constants. **00.**

ASTRID (*Advanced Sodium Technological Reactor for Industrial Demonstration*) : démonstrateur d'intégration technologique per-

mettant la démonstration de sûreté et de fonctionnement à l'échelle industrielle de réacteurs rapides refroidis au sodium de 4^e génération, à l'étude au Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives. **13, 19.**

ATD : voir **Analyse thermique***.

ATS : voir **Analyse thermique***.

Austénitique (structure) : structure cristalline cubique et à faces centrées, rencontrée dans certains alliages métalliques, en particulier certains aciers. **13, 14, 17, 63-65, 72, 77, 83, 100, 112, 113, 151, 152, 158, 169, 171-173, 175, 178, 189-191.**

Austénoferritique : les aciers inoxydables austéno-ferritiques contiennent de 20 à 30 % de chrome, de 2 à 10 % de nickel et une teneur en azote comprise entre 0,1 et 0,3 %. Le principal avantage de ces aciers réside dans leurs excellentes propriétés de traction, combinées à une bonne ductilité et à une bonne tenue au choc. **185.**

Bande de glissement persistante : fine lamelle dans laquelle se localise la déformation plastique pendant un chargement cyclique.

Boucle de dislocation : ligne de **dislocation*** refermée sur elle-même (voir encadré, *supra*, p. 20). **130, 158.**

Calcul à pseudopotentiels : méthode de modélisation de molécules ou de matériaux visant à remplacer le potentiel d'interaction coulombien du noyau et les effets des électrons dits « de cœur », considérés comme fortement liés, par un potentiel effectif interagissant uniquement avec les électrons dits « de valence ». Cette approximation présente un grand intérêt dans le calcul théorique de la structure électronique de la matière, car elle permet de ne traiter explicitement que les électrons de faible énergie (qui sont constitutifs, par exemple, de liaisons chimiques) et crée ainsi un gain important en ressources informatiques nécessaires aux calculs.

CALPHAD : méthode semi-empirique de calculs de **diagrammes de phases***. **49, 51, 52, 117, 119, 120, 124, 152.**

Cascade (de déplacements) : déplacements en chaîne d'atomes provoqués dans un matériau par le choc balistique entre une particule incidente (neutron, ion) et un atome du matériau. **14, 15, 17, 22, 34, 41, 43, 53-55, 117, 127-131.**

Cellule blindée (ou **cellule de haute activité*** ou **cellule chaude***) : enceinte blindée destinée à recevoir des objets fortement radioactifs. Ces objets peuvent être manipulés ou traités par des moyens de manipulation à distance ou entreposés. **96, 99, 100.**

Champ de phase (méthode de type) : méthode de simulation des solides et/ou liquides où les différentes phases en présence sont représentées par des champs continus. **27.**

Champ moyen auto-cohérent (méthode du) : méthode statistique pour le calcul des coefficients de transport de la matière dans un matériau décrit sur un réseau. **33, 34, 39, 58.**

Champ de Volterra : champ de déplacement élastique dans un matériau, qui accommode le cisaillement associé à une **dislocation***. **164.**

Charpy : voir **Essai de résilience***.

Cission critique : la déformation plastique d'un matériau est due au déplacement des dislocations dans leur plan de glissement. Le glissement commence dès que la contrainte atteint une valeur seuil, dite « cission critique ». **71.**

Cission résolue : projection du tenseur des contraintes sur un système de glissement caractérisé par un plan et une direction de glissement. Il s'agit de la contrainte de cisaillement agissant sur ce plan parallèlement à la direction de glissement. **21, 71, 165.**

Clivage : aptitude de certains matériaux à se fracturer selon des surfaces planes dans des directions privilégiées, lorsqu'ils sont soumis à un effort mécanique. **14, 79, 81, 185-187.**

Cœur de dislocation : zone d'une dislocation où les déformations sont localement importantes, et où la théorie élastique n'est pas applicable. **164.**

Combustion massive* : voir **Taux de combustion***.

Contrainte : en mécanique des matériaux, force appliquée sur un corps par unité de surface. On distingue les contraintes de compression et de cisaillement. Plus généralement, dans un solide, la contrainte est un champ tensoriel. Si le solide est élastique, le champ de contraintes est relié au champ de déformations par la loi de Hooke. **2, 8-10, 12-14, 16, 18, 20, 21, 27, 33, 39, 41, 46, 64, 65, 67, 71-77, 79, 81, 82, 87, 95, 97, 101, 102, 107-109, 111, 148, 149, 151, 163-167, 169-173, 176-178, 181, 182, 187, 189, 190-192, 194-196.**

Contrainte de Peierls : contrainte de cisaillement à partir de laquelle une **dislocation***, se met en mouvement. **163-165, 167, 170.**

Corrosion sous contrainte assistée par l'irradiation (IASCC) : mode d'endommagement observé notamment dans les structures internes de réacteurs nucléaires à eau légère (REL) qui sont soumises à un milieu caloporteur chimiquement agressif, à des contraintes mécaniques et à l'irradiation. Elle se traduit par une fissuration intergranulaire de composants tels que les vis de liaison ou les plaques de renforts. **9, 10, 107, 108, 189, 190.**

Critère de Hill : critère qui généralise le **critère de von Mises*** pour des matériaux anisotropes. **65, 77, 108.**

Critère de Griffith : critère de rupture d'un matériau fissuré, reliant la contrainte à rupture, la longueur de la fissure, le module d'Young et la contrainte de clivage du matériau (p. 77). **79, 187, 190.**

Critère de von Mises : critère de plasticité permettant de savoir si une pièce placée sous une sollicitation mécanique donnée se déforme plastiquement ou si elle reste dans le domaine élastique. Le critère compare la limite élastique du matériau à une contrainte équivalente construite à partir du tenseur des contraintes dans la pièce. **171.**

Croissance : variation dimensionnelle à volume constant sans contrainte appliquée, se produisant dans un matériau sous irradiation. **7, 9, 10, 13, 14, 16, 17, 39, 59, 60, 68, 72, 83, 105, 114, 118, 147-149, 172, 173, 176, 178, 189, 191.**

Crowdion (configuration) : possibilité de mouvement des atomes dans les réseaux cristallins. Cette configuration correspond à la présence d'un atome supplémentaire situé dans le plan du réseau mais pas dans une position interstitielle. Ce phénomène conduit à la formation d'un système de plusieurs atomes situés dans des positions de non-équilibre qui peuvent se déplacer dans le réseau cristallin dans les deux directions, le long de la rangée atomique. **137, 138.**

CVI (Chemical Vapor Infiltration) : procédé de fabrication de matériaux composites dans lequel le matériau liant les fibres est produit *in situ* dans la structure fibreuse par infiltration de réactifs chimiques en phase vapeur. **197-199.**

DBTT (Ductile-to-Brittle Transition Temperature) : voir **Transition fragile-ductile***.

Défaut ponctuel : défaut localisé en un point d'un réseau cristallin, résultant soit d'un atome manquant (**lacune***), soit d'un atome supplémentaire situé entre les positions atomiques normales (**interstitiel***), soit d'un atome étranger substitué à l'un des atomes du réseau. Une **paire de Frenkel*** est produite par le déplacement d'un atome hors de son site dans le cristal, créant ainsi une lacune et un interstitiel. **16, 58, 133, 152.**

Défaut de Schottky : terme d'usage consacré utilisé, d'habitude, pour un défaut stœchiométrique dans un composé AB_2 formé par deux **lacunes*** de B et une de A. Le défaut stœchiométrique formé par trois **interstitiels*** est parfois désigné « anti-Schottky ». Comme pour les **paires de Frenkel***, les trois lacunes, ou interstitiels, ne sont pas forcément liées.

DFT (Density Functional Theory) : voir **Théorie de la Fonctionnelle de la Densité***.

Diagramme des phases : représentation graphique utilisée en thermodynamique, généralement à deux ou trois dimensions, représentant les domaines de l'état physique d'équilibre d'un système (corps pur ou mélange de corps purs), en fonction de variables choisies pour faciliter la compréhension des phénomènes étudiés. Les diagrammes les plus simples concernent un corps pur avec pour variables la température et la pression ; les autres variables souvent utilisées sont l'enthalpie, l'entropie, le volume massique, ainsi que la concentration en masse ou en volume d'un des corps purs constituant un mélange. **117.**

Diffraction d'électrons rétrodiffusés : voir **EBSD***.

Diffraction de Rayons X (DRX) : dans cette technique d'analyse des matériaux cristallins, un faisceau de rayons X est envoyé sur le cristal à analyser. Par la mesure des angles et de l'intensité des rayons diffractés, il est possible d'obtenir une image tridimensionnelle de la densité électronique dans le cristal. À partir de cette densité, on peut accéder à l'arrangement des atomes du cristal. **87, 88.**

Diffusion de Neutrons aux Petits Angles (DNPA) : l'expérience de DNPA consiste à envoyer un faisceau de neutrons de faible divergence incidente sur l'échantillon de matière à étudier et à mesurer grâce à un détecteur la variation d'intensité diffusée en fonction de l'angle de diffusion. Cette technique est utilisée pour déterminer les grandeurs moyennes qui caractérisent la taille et la forme des objets diffusants aux échelles spatiales allant de 0,5 à 50 nm. **19, 22, 93.**

Dimères : situation où deux molécules de structure similaire sont fortement rapprochées par des interactions intermoléculaires. **139.**

Dislocation : défaut linéaire affectant l'arrangement des atomes dans un solide cristallin. On distingue les dislocations associées à l'insertion d'un demi-plan d'atomes dans le cristal (dislocations coin) et celles associées à la coupure du cristal selon un demi-plan et au déplacement des atomes du cristal parallèlement au bord de ce demi-plan (dislocations vis). **147-151, 158, 161, 163-167, 169-173, 175-177, 181, 189-196, 203, 204.**

Diverteur (ou **divertor***) : dans un tokamak, machine de fusion thermonucléaire par confinement magnétique d'un plasma, le divertor est un composant qui assure (a) l'extraction de la puissance emportée par les particules échappant au confinement magnétique et (b) le pompage de ces particules, notamment l'hélium qui constitue la « cendre » de la réaction de fusion et qui étoufferait la production d'énergie de fusion s'il s'accumulait dans le plasma. **12.**

Dose (radioactive) : terme général indiquant la quantité de rayonnement ou d'énergie absorbée dans une masse spécifique. **8, 10-16, 22, 60, 88, 107, 111, 112-114, 129, 147-149, 152, 153, 159, 189, 191.**

dpa (déplacements par atome)* : voir **Nombre de déplacements par atome***.

Ductile : caractéristique d'un matériau capable de se déformer plastiquement avant de rompre (opposé à fragile). **13, 14, 74, 79, 95-98, 107, 181-183, 185, 186.**

Durcissement : évolution d'un matériau en cours de sollicitation mécanique, caractérisée par une microstructure plus résistante (généralement plus fine) et une hausse de la dureté et de la limite d'élasticité, contrainte à partir de laquelle le matériau quitte le régime de déformation élastique réversible. **13, 14, 16, 65, 72, 107, 118, 147-149, 157, 164, 170, 175, 181, 189-191, 194, 203.**

Dureté : aptitude d'un matériau à la résistance à la pénétration, au poinçonnement. **19, 85, 149.**

Dynamique d'amas : pour décrire l'évolution globale des populations de défauts et d'amas de défauts (cavités, boucles de dislocations) dans un matériau sans limitation d'espace et pendant des durées très longues, on recourt à la Dynamique d'amas ou « Cinétique Chimique Homogène (CCH) ». Cette méthode de simulation s'appuie sur les équations classiques de la vitesse absolue de réaction des défauts pour déterminer leur concentration dans le matériau en fonction du temps. **18, 19, 25-27, 33, 34, 39, 60, 114, 118, 128, 144, 148, 149, 157, 159, 189, 195.**

Dynamique des Dislocations (DD) : méthode de calcul analytique ou numérique visant à simuler les mécanismes de déformation plastique à l'échelle du grain (quelques μm) par une modélisation du comportement de l'ensemble des dislocations sous-jacentes. Le mouvement de ces défauts cristallins linéiques, leurs interactions mutuelles ou avec les autres éléments microstructuraux (joints de grains, précipités...) sont, en effet, responsables de nombreuses propriétés mécaniques du matériau (plasticité, **écrouissage***, tenue à la **fatigue***, **ténacité***...). **2, 19, 25-28, 63, 71, 72, 163, 171, 172, 193, 194.**

Dynamique moléculaire : méthode de simulation des molécules et des matériaux à l'échelle nanométrique qui décrit le mouvement des atomes dans le formalisme de la mécanique classique. Elle utilise une discrétisation du temps (calcul pas à pas) pour intégrer les équations de Newton et nécessite de disposer d'un modèle donnant les forces d'interaction entre les atomes. **14, 18, 19, 25-27, 33, 39, 43-46, 53, 63, 72, 117, 127-132, 163, 169.**

EBSD (Electron Backscatter Diffraction ou diffraction d'électrons rétrodiffusés) : technique d'analyse microstructurale permettant de mesurer l'orientation des cristaux dans les matériaux. **19, 67, 88, 89, 92, 94, 176, 182, 187.**

Écrouissage : opération consistant à frapper, laminier ou étirer un métal à une température inférieure à sa température de **recuit***. En augmentant les contraintes internes dans le matériau, l'écrouissage augmente, en général, sa résistance à la déformation. **11, 63, 73, 77, 81, 175, 181, 183, 194, 203, 204.**

EDS (Energy Dispersion Spectrometry) : technique d'analyse du spectre d'un rayonnement de rayons X émis par un matériau sous l'impact d'un faisceau d'électrons. Le spectre émis est caractéristique des éléments présents dans l'échantillon. L'EDS peut fournir l'analyse élémentaire d'un matériau sur des surfaces de la taille du nanomètre en diamètre. L'analyse peut servir à déterminer la composition élémentaire locale ou une cartographie de la distribution des éléments dans le matériau. **90.**

Effet de préchargement à chaud (ou effet WPS) : effet affectant la propagation de fissures dans un matériau, en fonction de son historique de chargement mécanique et thermique. **186, 187.**

Effet Wigner : relaxation des défauts d'irradiation dans le graphite, provoquée par une élévation de température. Cette relaxation, étant exothermique, contribue à échauffer le graphite, d'où un risque d'emballement thermique qui peut aboutir à un accident dans les réacteurs nucléaires utilisant du graphite comme modérateur. **7.**

Endommagement : réduction progressive des propriétés de résistance mécanique d'un matériau par évolution de sa microstructure, création de défauts ou de fissures. **27, 43, 53, 54, 63, 67, 69, 72, 73, 78, 81-83, 86, 98, 102, 105, 111, 112, 159, 161, 173, 175, 177-179, 181, 189, 190, 197.**

Énergie de Gibbs (ou enthalpie libre) : l'énergie de Gibbs d'un système est définie par son enthalpie H, son entropie S et la température T de la manière suivante : $G = H - TS$. Pour un système à température et pression constantes, la marche vers l'équilibre thermodynamique est associée à la minimisation de G. **52, 119.**

ERDA (Elastic Recoil Detection Analysis) : méthode d'analyse élémentaire de la surface d'un matériau par détection du recul élastique d'un faisceau d'ions envoyés sur l'échantillon : cette méthode convient bien à l'analyse des éléments légers, en particulier à l'hydrogène. **90, 91.**

Essai Charpy : voir **Essai de résilience***.

Essai de résilience (ou essai Charpy) : essai de choc sur éprouvette entaillée ayant pour but de déterminer la résistance d'un matériau à la rupture brutale en mesurant l'énergie nécessaire pour rompre l'éprouvette. Voir aussi **Résilience***. **97, 185.**

Extrusion : processus dans lequel on force un morceau de matière à passer à travers une ouverture, à l'aplomb de laquelle se produit une bande de glissement persistante. **171, 173.**

Facteur d'intensité de contrainte : quantité caractéristique d'un matériau, exprimée en $\text{MPa}\cdot\text{m}^{1/2}$, qui donne une mesure de sa **ténacité***. **79, 97.**

Facteur de Schmid : rapport de la **cission*** résolue au niveau d'un système de glissement du grain divisée par la contrainte uniaxiale de traction macroscopique appliquée au matériau. **73.**

Fatigue : affaiblissement des propriétés mécaniques d'un matériau par création de fissures sous l'effet de l'application de contraintes répétées. Dans le cas particulier de la **fatigue thermique***, lesdites contraintes proviennent de sollicitations thermiques par le biais de la dilatation. **14, 63, 64, 71, 73, 74, 78, 82-84, 105, 161, 171-173, 175, 179, 188.**

Fatigue thermique : mode d'endommagement produit par des fluctuations cycliques de contraintes dans des structures, elles-mêmes engendrées par des variations de température au cours du temps. **171, 172.**

Ferritique : qualifie une phase métallique cristallisée dans le système cubique centré (par analogie avec la ferrite constituée de fer pur). **8, 11-13, 89, 113, 114, 131, 152, 185, 204.**

Ferromagnétisme : propriété qu'ont certains corps de s'aimer très fortement sous l'effet d'un champ magnétique extérieur, et pour certains de garder une aimantation importante même après la disparition du champ extérieur.

FIB (Focussed Ion Beam ou faisceau d'ions focalisés) : technique de nano-usinage permettant la fabrication de lame mince pour **microscope électronique en transmission*** (épaisseur de quelques dizaines à quelques centaines de nanomètres) ou d'échantillon sous forme de pointes de quelques dizaines de nanomètres de rayon de courbure pour analyse par SAT (**Sonde**

Atomique Tomographique*). Un faisceau intense d'ions lourds de quelques dixièmes à quelques dizaines de keV est envoyé sur la zone à découper. **87, 92, 100.**

Figure de pôles : manière de représenter des orientations dans l'espace par projection stéréographique d'une sphère. En cristallographie, une figure de pôles correspond à une description de l'orientation du cristal. Dans un matériau polycristallin, la figure de pôles renseigne sur la statistique de l'orientation des cristallites. **88, 89.**

Fluage : déformation progressive d'un solide sous l'effet d'un champ de contraintes appliqué pendant des durées longues. Le fluage peut être activé par la chaleur (on parle alors de « fluage thermique ») et par l'irradiation. **9-14, 16-19, 69, 79, 85, 88, 89, 100-102, 105, 107-109, 149, 161, 175-179, 189, 190, 195, 196, 203, 204.**

Fluence* : unité de dose utilisée pour quantifier l'irradiation des matériaux. C'est le nombre de particules (par exemple, des neutrons) arrivant par unité de surface durant l'irradiation. **88, 102, 107, 108, 111, 149, 181, 189.**

Force de Peierls : correspond à la force de frottement du réseau cristallin qui s'oppose au glissement des **dislocations***. **41, 163-165, 167, 170.**

Fragilité : propriété d'un matériau qui se rompt sans déformation plastique préalable. **9, 95.**

Gaine* : enveloppe scellée entourant la matière combustible, destinée à assurer son isolation et sa tenue mécanique dans le cœur du réacteur. **7, 10-13, 15, 16, 88, 90, 91, 108, 119, 121, 133, 193-195.**

GFR (Gas-cooled Fast Reactor) : voir **RNR-G***.

Glissement dévié : changement de plan de glissement des **dislocations*** vis, qui permet d'accommoder plus aisément la déformation d'un cristal. **171, 204.**

Gonflement : phénomène affectant les matériaux sous irradiation. **7, 9-14, 16, 17, 91, 105, 107, 108, 112, 123, 134, 141, 145, 189, 191, 192, 195.**

Haltère (ou « *dumbbell* ») : dans un métal, paire d'atomes formée d'un atome auto-interstitiel qui partage un site du réseau cristallin avec un atome en position normale, donnant à la paire d'atomes une configuration en haltère. **26, 130, 134, 137-140, 158.**

Homogénéisation : dans le contexte de la mécanique des matériaux, méthode de calcul permettant de prévoir le comportement d'un matériau à l'échelle macroscopique en utilisant la description de son comportement à une échelle inférieure. Le changement d'échelles peut s'opérer soit au travers d'une modélisation (on parle alors de « modèle d'homogénéisation ») soit en représentant explicitement la microstructure numérique (on parle alors d'« homogénéisation numérique »). **19, 27, 67, 69, 71, 75-78, 88, 176, 181, 182, 191, 196-198.**

IASCC (Irradiation-Assisted Stress Corrosion Cracking) : voir **Corrosion sous contrainte assistée par l'irradiation***. **9, 108, 189, 190.**

Intermétallique : composé de deux ou plusieurs métaux (p. ex. : Nb_3Sn). Contrairement à un alliage, dans un composé intermétallique, les métaux sont en proportions stoechiométriques. **10.**

Interstitial : atome supplémentaire situé entre les positions atomiques normales d'un réseau cristallin (voir **Défaut ponctuel***). **60, 130, 137, 142, 144, 147-149.**

Interaction pastille-gaine (IPG)* : lors d'un transitoire de puissance, la température du crayon combustible augmente, provoquant une dilatation de la pastille qui conduit à un contact mécanique entre cette dernière et la gaine. Cela entraîne une augmentation locale de la contrainte sur la gaine, et de la corro-

sion sous contrainte pouvant entraîner la rupture de la gaine. Ce phénomène est appelé l'« Interaction Pastille-Gaine ». **194.**

Interphase : matériau de liaison entre la matrice et les fibres dans un matériau composite. **197, 198, 203.**

Isoplièthe : ligne joignant des points d'égale valeur sur une carte. **52.**

JANNUS : plate-forme d'outils de recherche comprenant des accélérateurs de particules et des moyens de caractérisation pour l'étude des matériaux sous irradiation. **19, 22, 93, 101, 102, 111, 115, 159, 190.**

Joint de grains : surface séparant deux cristaux d'orientation, de composition ou de structure différente. **15, 17, 72, 73, 92, 93, 112, 113, 143, 144, 151, 153, 154, 190.**

Laboratoire chaud : laboratoire spécialement conçu pour l'étude de matériaux ou d'objets radioactifs, par exemple des matériaux irradiés ou des composés chimiques contenant des radionucléides. **99.**

Lacune : site inoccupé dans un cristal (voir aussi **Défaut ponctuel***).

Lacune de miscibilité : solubilité partielle d'un composé dans un autre. **45, 123, 125.**

Liquidus : dans un **diagramme de phases***, lieu des points représentant les températures de début de solidification. **51, 119-121.**

Loi de comportement : relation empirique ou semi-empirique entre une propriété (d'un matériau, par exemple) et un paramètre intrinsèque au matériau (composition chimique, microstructure...) ou extrinsèque, lié au milieu et aux conditions d'essais (température, pression...). **78, 99, 100, 172, 173, 186, 193.**

Magnétite : minéral ferrimagnétique de la famille des oxydes. Elle cristallise dans le système cubique et fait partie du groupe des spinelles. Sa formule chimique est Fe_3O_4 .

Martensitique : qualifie une structure cristalline cubique centrée rencontrée dans certains alliages métalliques, en particulier certains aciers. Dans ces derniers, la structure martensitique peut être provoquée par une trempe suffisamment rapide pour bloquer la diffusion du carbone. Elle se présente sous forme d'une hiérarchie d'échelles (anciens grains austénitiques, paquets, blocs et sous-grains) et présente des densités de dislocations élevées. **8, 11, 12, 16, 71, 72, 90, 91, 123, 175-179.**

MEB : Microscopie Électronique à Balayage. **19, 68, 90, 92, 100, 102, 120, 176, 197.**

Mécanisme d'Orowan : mécanisme de contournement des précipités par les **dislocations*** en mouvement dans un matériau en cours de déformation plastique. **27, 169.**

Mécanisme de kick-out : mécanisme selon lequel un atome interstitiel peut éjecter un atome d'impureté en substitution sur son site, conduisant à la formation d'une impureté interstitielle. **143.**

MET : voir **Microscopie Électronique à Transmission***.

Méthode de type champ de phase : outil pour modéliser l'évolution des phases dans un milieu condensé. Son principe est de décrire l'état local de la matière à l'aide d'un ou de plusieurs champs de phase, qui peuvent souvent être assimilés à des paramètres d'ordre. Le point clé est que ces champs prennent des valeurs bien déterminées en volume, et qu'ils varient entre ces valeurs de manière continue à travers des interfaces diffuses. Les équations cinétiques pour les champs de phase sont couplées aux équations de transport qui pilotent le mouvement des interfaces (diffusion, hydrodynamique, contraintes élastiques...). **27.**

Microscopie électronique en transmission (MET) : La microscopie électronique en transmission permet une analyse d'échantillons solides à l'échelle atomique. Cette technique repose sur l'interaction d'un faisceau d'électrons avec la matière et la détection des électrons ayant traversé l'échantillon. Les échantillons étudiés doivent donc être préalablement amincis afin d'être transparents aux électrons. Les informations qui peuvent être obtenues par MET, sont la morphologie des matériaux, leur structure (amorphe ou organisée), la nature des défauts cristallins, l'orientation cristalline, la taille des grains pour les échantillons polycristallins. **22, 91.**

Microsonde (électronique, nucléaire) : outil d'analyse d'un échantillon solide, dans lequel un faisceau d'électrons (pour la microsonde électronique) ou d'ions (pour la **microsonde nucléaire***) est focalisé sur la surface de l'échantillon. Le spectre de rayons X émis ou d'ions diffusés renseigne sur la composition locale de l'échantillon. **87, 90, 91, 120.**

Microsonde nucléaire : voir **Sonde nucléaire***.

Microstructure : appliqué à un matériau, ce terme désigne la forme, la taille et l'agencement de ses composants (grains d'un matériau polycristallin, minéraux) et de ses vides (porosité, **lacunes***) à l'échelle microscopique. **7, 14, 16-19, 25-28, 39, 45, 55, 57, 58, 60, 65, 67-69, 71-76, 82, 87, 90, 91, 105, 107, 111, 114, 115, 117, 118, 120, 125, 128, 137, 142, 145, 147-151, 154, 157, 158, 160, 171, 175, 178, 182, 187, 189, 190, 192, 195, 197, 198, 203.**

Modèles cinétiques : en physique des matériaux, modélisation de l'évolution temporelle des matériaux en vieillissement thermique ou sous irradiation. **26, 27, 33, 34, 48, 57-61, 125, 128, 144, 157, 158.**

Monte-Carlo cinétique : en physique des matériaux ou en chimie, méthode utilisée pour modéliser les sauts d'un système d'un état initial vers un ensemble d'états finals possibles, le nombre total de sauts effectués étant régi par un processus stochastique. **19, 25, 26, 33, 34, 39, 57, 59, 60, 128, 153, 154, 157.**

Montée des dislocations : déplacement d'une **dislocation*** en dehors de son plan de glissement. Ce processus a lieu grâce à la diffusion des **lacunes*** ou d'atomes **interstitiels*** dans le matériau, vers le cœur de la dislocation. **18, 72, 107, 173, 176, 189.**

MTR (Material Test Reactor) : réacteur expérimental destiné à l'étude du comportement des matériaux et combustibles sous irradiation. **19, 105, 106, 109, 110.**

Niveau de Fermi : dans la théorie électronique des solides, le niveau de Fermi est le niveau d'énergie correspondant au potentiel chimique des électrons, c'est-à-dire au niveau d'énergie auquel un état électronique, à l'équilibre thermodynamique, a la même probabilité d'être occupé ou vide. **133.**

Nombre de déplacements par atome⁺ (nombre de dpa)⁺ : nombre de fois que chaque atome d'un échantillon donné de matière solide a été éjecté de son site sous l'action d'un rayonnement. Cette unité est bien adaptée pour quantifier les irradiations dans les métaux. **15, 54.**

ODS (Oxide Dispersion Strengthened) : aciers renforcés par une dispersion d'oxydes nanométriques qui sont envisagés comme matériaux de **gainage*** du combustible des réacteurs de génération IV refroidis au sodium. Ils présentent, en effet, une bonne stabilité dimensionnelle sous irradiation grâce à leur structure cubique centrée, ainsi que d'excellentes propriétés en **fluage*** thermique, grâce aux nano-renforts. **8, 11, 12, 37, 55, 91-94.**

OSIRIS : voir **Réacteur OSIRIS***.

PAF : voir **Premier atome frappé***.

Paire de Frenkel : deux défauts, un lacunaire et un interstitiel, dans un matériau (voir **Défaut ponctuel***). Dans une partie de la littérature on sous-entend que ces défauts sont liés, ou au moins

proches l'un de l'autre ; mais la définition de « paire » peut néanmoins s'entendre uniquement par rapport au dénombrement des défauts dans une approche statistique. Le plus souvent, on fait référence à une lacune et un interstitiel du même élément, auquel cas la paire de Frenkel est un défaut stoechiométrique. **129, 134, 143.**

PKA (Primary Knocked-on Atom) : voir **Premier atome frappé***.

Péritectoïde : se dit d'une réaction dans laquelle un solide se décompose de façon isotherme réversible en un autre solide et une solution solide. **120.**

Polytypes : formes de structure cristalline proches, consistant en des couches identiques différant seulement par la façon dont elles sont empilées. **133.**

Potentiel de Peierls : paysage énergétique bidimensionnel vu par une **dislocation*** rectiligne, lors de son mouvement dans le cristal. **164, 165.**

Potentiel interatomique : potentiel servant à décrire l'interaction entre atomes dans une molécule ou un matériau. L'utilisation de potentiels interatomiques – empiriques ou semi-empiriques – permet de remplacer la description fine de la structure électronique des liaisons interatomiques par des fonctionnelles judicieusement choisies pour reproduire ces liaisons interatomiques et simplifier ainsi la modélisation du système. **27, 34, 36, 45, 46.**

Premier atome frappé (PAF) (en anglais : Primary Knocked-on Atom, PKA) : voir aussi **Spectre de primaires***. **15.**

Puits : dans un matériau, lieu où les **défauts ponctuels*** peuvent être piégés, ou absorbés. Il s'agit, par exemple, de défauts de dimensionnement plus élevé, comme **dislocations***, surfaces, interfaces, **joints de grains***. **16, 17, 39, 59, 60, 118, 134, 143, 151, 154, 158.**

Radiolyse : dissociation de molécules par des rayonnements ionisants. **7, 107, 108.**

Radionucléide : nucléide instable d'un élément qui décroît ou se désintègre spontanément en émettant un rayonnement.

Rayonnement synchrotron : toute particule chargée subissant une accélération émet un rayonnement électromagnétique. Cette propriété est exploitée pour produire des faisceaux de rayons X intenses dans des accélérateurs de particules dédiés, comme, par exemple, les synchrotrons ESRF ou Soleil. Le rayonnement synchrotron est utilisé pour sonder la structure de la matière à l'échelle atomique. **85, 87.**

Réacteur Jules Horowitz (RJH) : réacteur expérimental, actuellement en construction sur le site de Cadarache. Le RJH est dédié à l'étude des matériaux sous irradiation, à l'étude de certaines situations accidentelles et à la production de radio-isotopes. **19, 105, 106, 108, 109.**

Réacteur OSIRIS : réacteur expérimental, sur le site de Saclay. Osiris est dédié à l'étude des matériaux sous irradiation et à la production de radio-isotopes. **19, 22, 85, 105-107.**

Recuit de résistivité : technique d'analyse d'un échantillon métallique consistant à mesurer sa résistivité après recuit à différentes températures. Cette technique renseigne sur le type de défauts cristallins présents dans le solide, ces derniers ayant une influence sur la résistivité du matériau. **138, 140, 153.**

Recuit des défauts : élimination au moins partielle de défauts dans les matériaux, sous l'effet d'une augmentation de température. **136, 195.**

Résilience : aptitude d'un matériau à la résistance aux chocs ; elle est caractérisée par l'essai de choc et s'exprime en joule par cm². **95-97, 100, 185.**

RJH : voir **Réacteur Jules Horowitz***.

RNR-G* : réacteur à neutrons rapides refroidi au gaz.

RTHT (Réacteur à Très Haute Température)* : version française du VHTR (*Very High Temperature Reactor*).

Rupture ductile : rupture d'un matériau après déformation plastique. **13, 79, 181, 182, 185-188.**

Rupture fragile : la rupture d'un matériau est dite « fragile » si elle n'est pas précédée d'une déformation plastique. Voir aussi **Fragilité***. **79, 95, 96, 161, 181, 182, 185-188.**

Solidus : dans un **diagramme de phases***, lieu des points représentant les températures de fin de solidification. **51, 119-121.**

Solvus : dans un **diagramme de phases***, lieu des points des compositions maximales limitant la solubilité partielle à l'état solide. **119.**

Sonde Atomique Tomographique (SAT) : outil analytique de la distribution spatiale des atomes dans un matériau. Son principe de fonctionnement repose sur l'évaporation par effet de champ des atomes de surface d'un échantillon taillé en pointe. En présence d'un champ électrique intense, un atome situé à la surface d'un métal peut être arraché et s'évaporer sous la forme d'un ion. Les ions évaporés sont ensuite accélérés par le champ électrique et projetés vers un détecteur spatial. La position initiale de l'atome dans l'échantillon est obtenue par projection inverse. La nature de l'ion peut être déterminée par spectrométrie de masse à temps de vol. L'échantillon étant évaporé atome par atome, couche atomique par couche atomique, on obtient alors une cartographie de la distribution des atomes dans l'échantillon. **19, 92, 93, 113, 151, 158, 159.**

Sonde Nucléaire (SN) (ou **microsonde nucléaire**) : la (micro)sonde nucléaire est un outil d'analyse non destructif permettant la caractérisation élémentaire d'échantillons de nature solide à l'échelle du micromètre (interfaces et grains de matériaux...). La méthode repose sur la détection et la spectrométrie des rayonnements émis par l'interaction d'un microfaisceau d'ions légers avec les atomes composant les éléments majeurs et traces des échantillons. **90.**

Source de Frank-Read : mécanisme par lequel une **dislocation*** ancrée émet des boucles de dislocation, sous l'action d'une contrainte.

Sous-joint : joint de grains de faible désorientation. Les sous-joints peuvent être vus comme un réseau 2D de dislocations. **71, 72, 175, 176.**

Spectre de primaires (ou **spectre de PKA, Primary Knocked-on Atoms**) : distribution en énergie des premiers atomes déplacés dans une **cascade de déplacements*** lors d'une irradiation. Ce spectre permet de connaître l'énergie transférée aux différents atomes constituant le matériau. **54.**

Spectroscopie de rayons X : analyse de la composition atomique d'un matériau par mesure du spectre de rayonnement X émis par l'échantillon sous bombardement électronique. Le faisceau exciteur peut être focalisé et peut balayer l'échantillon (cette « microanalyse » X dite « **EDS***, *Energy Dispersion Spectrometry* » est souvent implantée dans un **microscope électronique à balayage***), fournissant ainsi, en plus d'une image de sa surface, une cartographie de sa composition.

Striction : mode de ruine provoquée par la localisation de la déformation sur une portion d'une éprouvette lisse. Il se modélise souvent par une instabilité du diamètre de l'éprouvette conduisant à une réduction locale de plus en plus rapide, au cours de la déformation. **98, 177, 178, 191.**

Surface de charge : en mécanique des matériaux, surface dans l'espace des contraintes. Les vecteurs contraintes à l'intérieur de cette surface correspondent à des états élastiques, les vecteurs sur la limite correspondent à des états plastiques. L'extérieur de la surface est inaccessible. La surface est appelée « critère de plastification » ou « surface de charge ». **108.**

Taux de combustion* : au sens propre, il correspond au pourcentage d'atomes lourds (uranium et plutonium) ayant subi la fission pendant une période donnée. Couramment utilisé pour évaluer la quantité d'énergie thermique par unité de masse de matière fissile obtenue en réacteur entre le chargement et le déchargement du combustible, il s'exprime en mégawatts jour par tonne (MW-j/t) (**Combustion massive***). Le **taux de combustion de rejet** est le taux auquel l'assemblage combustible, après plusieurs cycles d'irradiation, doit être définitivement déchargé. **7, 11.**

Température de Debye : température caractéristique T_d , apparaissant dans la théorie de la chaleur spécifique des solides, et définie comme $T_d = h.v_{\max}/k$, où h est la constante de Planck, k la constante de Boltzmann et v_{\max} la fréquence maximale des vibrations du réseau d'atomes formant le solide (phonons). **35.**

Ténacité : quantité caractéristique d'un matériau, mesurant sa résistance à la propagation de fissures. **9, 10, 13, 14, 19, 63, 79, 85, 96, 107, 185-187, 189, 191, 203.**

Texture : orientation préférentielle des cristallites d'un matériau polycristallin. La texture s'évalue par **diffraction de rayons X*** ou de neutrons (méthode globale), ou bien par microscopie électronique à balayage avec **EBSD*** (détermination de l'orientation cristallite par cristallite). On peut représenter la texture par des **figures de pôles*** correspondant aux densités de plans cristallographiques. **13, 78, 87, 88, 108.**

Théorie de la Fonctionnelle de la Densité (DFT) : théorie de champ moyen couramment utilisée pour décrire des systèmes d'atomes (dans des molécules ou des matériaux) avec un grand nombre d'électrons, sans traiter explicitement l'interaction coulombienne entre ces derniers. Pour reproduire avec précision la liaison chimique entre atomes il est en effet nécessaire de traiter au niveau quantique les interactions entre noyaux atomiques et électrons. En physique des matériaux, la DFT est utilisée pour étudier les structures et énergies de défauts cristallins : **défaut ponctuel*** de type **lacune***, **interstitiel*** ou antisites, **dislocations***, insertion de solutés ou de dopants. À partir des énergies obtenues par les codes de DFT, on peut remonter par différence avec l'état cristallin sans défaut aux énergies physiquement pertinentes (énergies de formation de défauts, de mise en solution de dopants, etc.). **25, 29, 136, 141, 207, 212.**

Trajet de chargement : évolution de l'état de contraintes mécaniques dans un matériau, au cours du temps. **108, 186.**

Transition fragile-ductile (en anglais : *ductile-to-brittle transition temperature, DBTT*) : la plupart des matériaux cristallins sont fragiles à basse température et deviennent ductiles au-dessus d'une certaine température. Cette température est la température de transition fragile-ductile. On détermine cette température en testant la **résilience*** d'une éprouvette entaillée avec un mouton **Charpy***. **185, 208, 212.**

Transmutation* : transformation d'un nucléide en un autre par une réaction nucléaire. **10, 12-14, 16-18, 22, 111, 123, 189, 203.**

Trempe : refroidissement (souvent rapide et, en général, volontaire et contrôlé) d'un métal ou d'un alliage. La trempe influe sur la structure cristalline du matériau, et sur ses caractéristiques mécaniques. **8, 10, 11, 39.**

Vecteur de Burgers : vecteur représentant l'amplitude et la direction de la déformation transportée par une **dislocation***. **20, 21, 59, 63, 64, 71, 147, 149, 164-166, 181, 191.**

VER : voir **Volume Élémentaire Représentatif***.

VHTR (*Very High Temperature Reactor*) : voir **RTHT***.

Viscoplasticité : en mécanique des milieux continus, théorie qui décrit le comportement inélastique d'un solide en fonction de sa vitesse de déformation. Le **fluage*** est une des manifestations classiques d'un comportement viscoplastique. **63, 65, 71-74, 75, 77, 176, 181, 191, 194.**

Volume Élémentaire Représentatif (VER) : en physique des matériaux, une des étapes principales de l'**homogénéisation*** d'un matériau (détermination d'un matériau homogène équivalent) consiste à déterminer un Volume Élémentaire Représentatif (VER), volume minimal sur lequel on doit moyenner les propriétés dudit matériau pour obtenir une valeur moyenne stable, indépendante de l'endroit du matériau autour duquel cette moyenne est construite. **75.**

Zirconium : élément métallique de numéro atomique 40. Les alliages de zirconium sont très utilisés pour les **gainés*** de combustible de réacteurs à eau. **2, 7, 10, 13, 14, 17, 29, 30, 60, 65, 67-69, 72, 74, 75, 78, 82, 87, 88, 90, 91, 93, 100, 107-109, 119-121, 129, 130, 147-150, 165-167, 193-196.**

Zone de décharge (ou **zone d'obscurcissement**) : zone de relaxation des contraintes, de part et d'autre des lèvres d'une fissure soumise à un chargement. **82.**



Table des matières

Préface	5
Introduction	7
Introduction	7
Les matériaux du nucléaire	9
<i>Les matériaux utilisés dans les réacteurs à eau sous pression</i>	9
<i>Les matériaux utilisés dans les réacteurs de fission à neutrons rapides</i>	11
<i>Les matériaux utilisés dans les réacteurs de fusion</i>	12
<i>Les matériaux utilisés dans les applications à haute température</i>	13
Effets d'irradiation : les manifestations macroscopiques	13
<i>La stabilité dimensionnelle sous irradiation</i>	13
<i>Durcissement et fragilisation sous irradiation</i>	13
<i>Les effets de l'environnement</i>	14
Effets d'irradiation : les mécanismes à l'échelle atomique	14
<i>Les cascades de déplacements atomiques ou dommage balistique</i>	14
<i>Encadré : Les cristaux et leurs défauts</i>	15
<i>La production d'atomes étrangers par réactions nucléaires de fission et de transmutation</i>	16
<i>L'évolution cinétique de la microstructure : la part des défauts ponctuels</i>	16
<i>L'évolution cinétique de la microstructure : la stabilité de phases sous irradiation</i>	16
L'approche multi-échelles (spatiale et temporelle) de la modélisation des matériaux	17
<i>Les échelles et outils de modélisation</i>	18
La validation expérimentale	19
<i>Les outils de caractérisation des matériaux</i>	19
<i>Encadré : Les dislocations</i>	20
<i>Les moyens d'irradiation</i>	22
Bonne lecture...	22
Les outils de la modélisation	23
L'approche multi-échelles de la modélisation des matériaux	25
Les outils de la modélisation physique des matériaux pour le nucléaire	25
Les outils de la modélisation mécanique des matériaux pour le nucléaire	27
Les calculs électroniques <i>ab initio</i> pour la matière condensée	29
La théorie de la fonctionnelle de la densité	29
<i>Mise en œuvre numérique : pseudopotentiels et fonctions de base</i>	30
<i>Les codes de calcul</i>	31
Les potentiels interatomiques	33
Le paysage énergétique à l'échelle atomique	39
Les simulations de dynamique moléculaire	43
Potentiels thermodynamiques et potentiels de force moyenne	45
Les diagrammes de phase	49
La thermodynamique du réseau rigide	49
<i>Le modèle d'Ising</i>	49
<i>L'entropie de configuration</i>	50
<i>Les autres sources d'entropie</i>	51
La méthode CALPHAD	51
<i>Le choix des données expérimentales</i>	51
<i>Le choix des modèles thermodynamiques</i>	51

<i>Le principe de l'optimisation</i>	52
<i>Le calcul d'un diagramme de phases</i>	52
La simulation des dommages primaires dans les matériaux en réacteur	53
Les dommages primaires	54
L'approximation des collisions binaires	54
Les estimateurs des dommages primaires	54
Les dommages primaires dans les ODS	55
La limitation de l'approximation des collisions binaires	55
Les modèles cinétiques	57
Monte-Carlo cinétique atomique (AKMC)	57
Les équations de diffusion en champ moyen	58
Monte-Carlo cinétique sur objets (OKMC) et sur événements (EKMC)	59
La dynamique d'amas	60
La dynamique des dislocations	63
Le principe de la dynamique des dislocations	63
<i>Les forces exercées sur les dislocations</i>	64
<i>La vitesse des dislocations</i>	64
<i>Les collisions et recombinaisons des dislocations</i>	64
Le code NUMODIS	64
La production de microstructures de matériaux pour la simulation	67
Les microstructures réelles	67
La génération de microstructures virtuelles	67
La viscoplasticité cristalline	71
Quelques exemples d'application de la viscoplasticité cristalline aux matériaux du nucléaire	71
<i>Fatigue et fluage à haute température des aciers martensitiques</i>	71
<i>Le durcissement d'irradiation</i>	72
<i>Localisation de la déformation</i>	73
Les méthodes d'homogénéisation en mécanique des milieux continus	75
L'approche analytique de l'homogénéisation	75
L'approche numérique de l'homogénéisation	76
La confrontation des méthodes analytiques et numériques d'homogénéisation	77
<i>Encadré : La rupture des matériaux</i>	79
Approche locale et approche probabiliste de la rupture des matériaux	81
L'approche locale de la rupture	81
L'approche probabiliste de la rupture	81
Endommagement et rupture dans le volume élémentaire	82
La modélisation des réseaux de fissures	82
Les outils de validation expérimentale	85
Les outils de caractérisation microscopique	87
La diffraction des rayons X et des neutrons	87
La diffraction des électrons rétrodiffusés (EBSD : <i>Electron Backscatter Diffraction</i>)	89
La microsonde électronique et nucléaire	90
La Microscopie Électronique en Transmission (MET)	91
Un outil de préparation des échantillons : les faisceaux d'ions focalisés (FIB)	92
La Sonde Atomique Tomographique (SAT)	92
Les outils de caractérisation mécanique	95
Les essais mécaniques Charpy et mini-Charpy	95
Les essais de ténacité sur petites éprouvettes (CTR)	96
Les essais de flexion ou de traction sur mini-éprouvettes	97
<i>Les éprouvettes de traction entaillées (AE)</i>	98
Les essais <i>Small Punch Test</i> (SPT)	99
Les techniques de reconstitution d'éprouvettes	100
Les essais de micro- ou nano-indentation	100
Les essais de compression par micro-piliers	100
L'étude expérimentale du fluage d'irradiation par micro-machines (MEMS)	100

Les essais de traction miniaturisés «Mini-MécaSiC »	101
Les réacteurs expérimentaux et les essais en pile	105
Les principaux enjeux des expérimentations sous flux neutronique	105
Les réacteurs de recherche sur les matériaux dans le monde	105
Les différents types d'irradiation de matériaux	106
<i>Les irradiations dites « de cuisson »</i>	106
<i>Les irradiations fortement instrumentées : un besoin croissant pour la modélisation et la simulation du comportement des matériaux sous flux</i>	107
Les outils d'irradiation par particules chargées	111
L'irradiation aux ions	111
Les irradiations aux électrons	112

Thermodynamique et cinétique : exemples de modélisation

Thermodynamique et cinétique : exemples de modélisation	117
La thermodynamique des alliages de Zr : application au système Er-Zr	119
La détermination expérimentale du diagramme de phases	120
La modélisation thermodynamique	120
La thermodynamique des alliages fer-chrome	123
Les potentiels empiriques – construction directe du diagramme d'équilibre des phases	123
Les modèles sur réseau rigide	125
La modélisation du dommage primaire d'irradiation par dynamique moléculaire	127
Les deux phases de la cascade de déplacements	127
Après la cascade : la nature des dommages créés	128
Structure et cinétique des défauts ponctuels dans le carbure de silicium	133
La structure des défauts ponctuels	133
Migration de défauts et recombinaisons	134
Structure et cinétique des défauts d'irradiation dans le fer	137
Les défauts ponctuels et leurs agrégats dans le fer- α	137
Les interactions du carbone avec des défauts ponctuels	138
<i>La confrontation modélisation-expérience</i>	139
Énergétique et cinétique de l'hélium dans le fer et les alliages à base de fer	141
Description de l'hélium dans le fer α par des méthodes <i>ab initio</i>	141
L'auto-piégeage des atomes d'hélium et leur interaction avec les auto-défauts	141
La diffusion de l'hélium dans le fer α	142
La ségrégation de l'hélium aux joints de grains	143
Le rôle essentiel des impuretés	144
L'évolution de la microstructure des alliages de Zr	147
Des défauts ponctuels qui diffusent de façon anisotrope	147
L'évolution de la microstructure du zirconium sous irradiation	148
La croissance des alliages Zr sous irradiation	148
Fluage et durcissement des alliages de zirconium	148
Cinétique de ségrégation provoquée par l'irradiation dans les aciers austénitiques	151
Description du phénomène	151
Les modèles continus de la ségrégation produite par l'irradiation	152
Les modèles atomiques de la ségrégation produite par l'irradiation	152
L'évolution microstructurale dans les alliages modèles d'aciers de cuve	157
Le vieillissement thermique des aciers de cuve	157
Accélération de la diffusion et couplage des flux sous irradiation	158
L'évolution de la microstructure des aciers de cuve sous irradiation	158

Plasticité et rupture : exemples de modélisation

Plasticité et rupture : exemples de modélisation	161
Le calcul <i>ab initio</i> de la plasticité : structure de cœur et mécanismes de glissement des dislocations vis	163
La plasticité des métaux cubiques centrés	163
La plasticité du zirconium	165
La modélisation de la mobilité des dislocations	169
L'ancrage des dislocations	169

Le durcissement par effet de solution solide	170
L'activation thermique de la mobilité des dislocations	170
La fatigue des aciers austénitiques inoxydables	171
La modélisation de l'endommagement d'un acier austénitique polycristallin	173
Déformation et endommagement des aciers martensitiques revenus à haute température	175
La modélisation de l'adoucissement par réduction des sous-joints	176
Endommagement et rupture en fluage	177
Le comportement macroscopique des aciers, déduit de la plasticité cristalline	181
La loi de plasticité cristalline	181
L'homogénéisation numérique du polycristal	181
L'approche locale de la rupture fragile et de la rupture ductile des aciers	185
La simulation de l'effet de préchargement à chaud	186
La modélisation de la rupture fragile, dans le cadre de la plasticité cristalline	187
Déformation et endommagement des aciers austénitiques irradiés	189
Le fluage d'irradiation	189
L'étude de la localisation de la déformation et de ses conséquences sur la germination des fissures intergranulaires en corrosion sous contrainte assistée par irradiation (IASCC)	190
Dégradation des propriétés mécaniques des aciers austénitiques irradiés	191
La modélisation physique du comportement mécanique des alliages de zirconium, avant, après irradiation et en conditions accidentelles	193
Vers une loi de comportement mécanique des alliages de zirconium	193
L'effet de l'irradiation sur le comportement mécanique des alliages de zirconium	194
Le fluage des alliages de zirconium	195
Comportement mécanique et endommagement des matériaux composites SiC/SiC	197
Le comportement mécanique à l'échelle du toron	197
Le comportement mécanique à l'échelle du composite tissé	198
Le comportement mécanique à l'échelle macroscopique	198
Conclusion	201
Les matériaux du nucléaire : quelques éléments de perspective	203
Glossaire-index	207

Ont collaboré à cet ouvrage :

Catherine Andrieux,
Manuel Athènes,
Guido Baldinozzi,
Jean-Luc Béchade,
Bernard Bonin,
Jean-Louis Boutard,
Yves Brechet,
Fabien Bruneval,
Chantal Cappelaere (Responsable de thème),
Sébastien Carassou,
Étienne Castelier,
Alain Chartier,
Emmanuel Clouet,
Mihai-Cosmin Marinica,
Jean-Paul Crocombette,
Laurent Dupuy,
Pierre Forget,
Chu Chun Fu,
Jérôme Garnier,
Lionel Gélébart,
Jean Henry,
Thomas Jourdan,
Laurence Lunéville,
Bernard Marini,
Estelle Meslin,
Maylise Nastar,
Fabien Onimus,
Christophe Poussard,
Laurent Proville,
Joël Ribis,
Christian Robertson,
David Rodney,
Guido Roma,
Maxime Sauzay,
David Simeone,
Frédéric Soisson,
Benoît Tanguy,
Caroline Toffolon-Masclet,
Patrick Trocellier,
Laurent Van Brutzel,
Lisa Ventelon,
Ludovic Vincent,
François Willaime,
Pascal Yvon.

... et, bien sûr, l'ensemble des membres du Comité scientifique des monographies DEN :

Bernard Bonin (Rédacteur en chef), Georges Berthoud,
Gérard Ducros, Damien Féron, Yannick Guérin, Christian Latgé,
Yves Limoge, Gérard Santarini, Jean-Marie Seiler, Étienne Vernaz
(Directeurs de Recherche).