

Simulation de l'évolution des microstructures de dislocations dans UO₂ : impact de la montée des dislocations à haute température

Aimé Bongiraud^{1,3*}, Bruno Michel¹, Laurent Dupuy², Philippe Carrez³

¹CEA, IRESNE, DEC, SESC, LM2C bat 151 Centre de Cadarache, F-13108, Saint Paul Lez Durance, France

²Université Paris-Saclay, CEA, Service de Recherche en Matériaux et procédés Avancés, F-91191, Gif-sur-Yvette, France

³Université Lille, CNRS, INRAE, Centrale Lille, UMR 8207—UMET—Unité Matériaux et Transformations, Lille, France

*aime.bongiraud@cea.fr

Résumé pour : poster

La compréhension du comportement mécanique du combustible nucléaire UO₂ à haute température est nécessaire pour évaluer le risque de rupture de la gaine dans des conditions de transitoires de puissance d'exploitation ou accidentels. Le comportement viscoplastique de l'UO₂ à haute température, tel que modélisé dans l'approche micro-mécanique actuelle ¹, repose sur une loi de fluage-restauration faisant intervenir la mobilité des dislocations par glissement et montée. L'interaction des dislocations agit sur le comportement mécanique à travers l'évolution de la densité de dislocations stockées dans le cristal avec la multiplication, la restauration dynamique par glissement dévié, et la restauration statique induite par la montée. Ce dernier mécanisme, reste mal compris et est souvent décrit par des modèles simplifiés. L'objectif de cette thèse est d'améliorer les modèles de montée des dislocations dans l'UO₂ à l'aide de simulations couplant la dynamique des dislocations discrètes (DDD) avec la diffusion des lacunes à l'origine de la montée des dislocations. Les outils envisagés sont NUMODIS pour la DDD et AMITEX_FFTP pour la diffusion. La modélisation par DDD détermine sur une configuration donnée la force locale projetée sur la direction de montée de la dislocation, permettant d'obtenir les concentrations de lacunes à l'équilibre au cœur de la dislocation. Les concentrations de lacune imposées le long des lignes de dislocation servent de données d'entrée pour la résolution des équations de diffusion fournissant en sortie le flux de lacune. Ce dernier est renvoyé au code de DDD afin de déterminer la vitesse de montée des dislocations et mettre à jour leur position. Cette approche permettra de mieux décrire les statistiques de montée et de restauration dans une microstructure réaliste, et d'intégrer l'impact des contraintes internes (interactions élastiques entre dislocations) sur la diffusion des lacunes. Les travaux actuels se concentrent sur le développement des méthodes numériques : implémentation de la cinématique de montée des dislocations sur NUMODIS ², et prise en compte des conditions de concentration imposée, par la méthode du « pseudo-matériau absorbant » ³, dans la résolution FFT de la diffusion. L'interface de couplage entre les codes, déjà existante pour des calculs de mécanique, sera ensuite adaptée à notre cas.

¹ S. ElBez et al., « Crystal Plasticity Model for UO₂ : Introduction of the Dislocation Climbing and Coupling with the Thermally Activated Gliding », *Journal of Nuclear Materials* 616 (octobre 2025): 156083, <https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2025.156083>.

² Botond Bako et al., « Dislocation Dynamics Simulations with Climb: Kinetics of Dislocation Loop Coarsening Controlled by Bulk Diffusion », *Philosophical Magazine* 91, n° 23 (2011): 3173-91, <https://doi.org/10.1080/14786435.2011.573815>.

³ Aaron A Kohnert et Laurent Capolungo, « A Novel Approach to Quantifying the Kinetics of Point Defect Absorption at Dislocations », *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 122 (janvier 2019): 98-115, <https://doi.org/10.1016/j.jmps.2018.08.023>.