

## Sujet de thèse 2017

### Compréhension du rôle des joints de grains dans le comportement en rupture de l'UO<sub>2</sub>

La décohésion des joints de grains est un phénomène à prendre en compte dans la modélisation thermomécanique d'un combustible de dioxyde d'uranium sous irradiation [1]. Actuellement, le modèle utilisé fait intervenir une contrainte à rupture seuil dont la valeur trouve son origine dans des mesures de propriétés à l'échelle macroscopique [2], [3]. Pour améliorer la précision des outils de simulation, il faut, d'une part, mieux connaître la nature et la répartition des joints de grains dans une céramique d'UO<sub>2</sub> polycristalline et, d'autre part, accéder à des grandeurs énergétiques et mécaniques utiles à la modélisation telles que la contrainte à rupture et la ténacité de façon sélective pour différents types de joints de grains.

Pour étudier les joints de grains dans le combustible polycristallin, nous proposons de mettre en œuvre au cours de cette thèse des expériences de MEB-EBSD mais aussi des techniques de caractérisation innovantes telles que l'EBS-3D [4] ou les expériences de 3DXRD sur synchrotron [5] qui permettent d'accéder au caractère complet des joints de grains, c'est-à-dire à tous leurs degrés de liberté géométriques qui ont une influence importante sur les propriétés macroscopiques. Ce type de caractérisations 3D permettra aussi de contribuer au développement de l'application VER (Volume Elementaire Représentatif) développée dans le cadre de la plateforme PLEIADES en apportant une meilleure connaissance de la forme des grains permettant de mieux générer les configurations initiales des calculs mettant en œuvre des polycristaux.

Pour déterminer des grandeurs énergétiques et mécaniques de différents types de joints de grains en prenant en compte l'effet des degrés de liberté géométriques et les structures atomistiques locales, nous proposons d'étudier expérimentalement un système modèle simple : le bicristal idéal constitué d'un unique joint de grains dont la structure atomique est parfaitement maîtrisée.

Des bicristaux d'UO<sub>2</sub> de géométrie différente seront ainsi élaborés par « soudage/diffusion » à haute température à partir de deux monocristaux préalablement découpés et orientés par la méthode de Laue [6]. La contrainte à rupture sera mesurée par essai de flexion et la ténacité sera déterminée au niveau du joint de grains par nanoindentation in-situ couplé à un MEB ou bien par « grooving technique ». Cette méthode consiste à réaliser une attaque thermique permettant de révéler le joint de grains puis à mesurer par AFM l'angle dièdre du sillon formé. Il est alors possible d'en déduire l'énergie du joint de grains et donc la ténacité. Les valeurs de contrainte à rupture et de ténacité seront déterminées pour les divers types de joints de grains et comparées à celles obtenues par des calculs de dynamique moléculaire qui seront réalisés en parallèle dans le laboratoire.

Ces résultats permettront de mieux connaître la nature et la répartition des joints de grains dans une céramique d'UO<sub>2</sub> polycristalline ainsi que leurs propriétés mécaniques. De telles données sont nécessaires pour poursuivre le développement des codes de performance de la plateforme PLEIADES utilisés pour modéliser le comportement thermomécanique du combustible UO<sub>2</sub> sous irradiation mais aussi pour contribuer au développement du modèle VER.

L'ensemble de ce travail de thèse sera réalisé grâce à plusieurs collaborations : au sein du département d'étude des combustibles avec le Laboratoire des Combustibles Uranium (LCU), avec l'Institut Néel de Grenoble et le CEA-DRF-INAC-PHELIQS-IMAPEC de Grenoble et à l'international avec le JRC-Karlsruhe (ex ITU). Le LCU contribuera au projet par la réalisation des expériences de MEB-EBSD, de nanoindentation in situ et des essais de flexion. Le JRC-Karlsruhe, avec qui nous entretenons une collaboration de longue date, dispose de monocristaux d'UO<sub>2</sub>, de moyens expérimentaux complémentaires des nôtres et d'une grande expérience sur les matériaux nucléaires. L'Institut Néel participera aux expériences d'AFM. Enfin, l'IMAPEC a une expertise reconnue en cristallogenèse de composés à base d'uranium et dispose d'outils de découpe et d'orientation par la méthode de Laue indispensables à la réalisation de ce projet.

## Références :

- [1] G. Boittin, "Décohésion intergranulaire dans les combustibles REP UO<sub>2</sub> et UO<sub>2</sub> dopé Cr," presented at the Rendez-vous SESC, Juin-2013.
- [2] A. G. Evans and R. W. Davidge, "The strength and fracture of stoichiometric polycrystalline UO<sub>2</sub>," *J. Nucl. Mater.*, vol. 33, no. 3, pp. 249–260, Dec. 1969.
- [3] R. F. Canon, J. T. A. Roberts, and R. J. Beals, "Deformation of UO<sub>2</sub> at High Temperatures," *J. Am. Ceram. Soc.*, vol. 54, no. 2, pp. 105–112, Feb. 1971.
- [4] K. Rudman *et al.*, "Three-dimensional characterization of sintered UO<sub>2+x</sub>: effects of oxygen content on microstructure and its evolution," *Nucl. Technol.*, vol. 182, no. 2, pp. 145–154, May 2013.
- [5] D. J. Jensen *et al.*, "X-ray microscopy in four dimensions," *Mater. Today*, vol. 9, no. 1–2, pp. 18–25, Jan. 2006.
- [6] N. Shibata, F. Oba, T. Yamamoto, and Y. I. §, "Structure, energy and solute segregation behaviour of [110] symmetric tilt grain boundaries in yttria-stabilized cubic zirconia," *Philos. Mag.*, vol. 84, no. 23, pp. 2381–2415, Aug. 2004.

## Contacts :

- Renaud Belin, CEA Cadarache, [renaud.belin@cea.fr](mailto:renaud.belin@cea.fr)
- Jean-Pascal Brison, Gérard Lapertot, Pheliqs-INAC, CEA-Grenoble, [jean-pascal.brison@cea.fr](mailto:jean-pascal.brison@cea.fr), [gerard.lapertot@cea.fr](mailto:gerard.lapertot@cea.fr)

## Détails pratiques :

- Le financement de la thèse est assuré par une bourse – « sujet phare », du CEA.
- Le doctorant sera basé au Département d'Etudes des Combustibles, Service d'Etude et de Simulation du Combustible du CEA Cadarache mais sera amené à séjourner au JRC- Karlsruhe ainsi qu'à Grenoble lors de campagnes expérimentales à l'IMAPEC ou à l'institut Néel.