



# Annnonce de Thèse

## Université Paris Saclay



### Modélisation de la diffusion atomique et de la dynamique d'amas de défauts dans des aciers alliés

Les matériaux utilisés dans les cuves de réacteurs nucléaires subissent une irradiation neutronique responsable d'une accumulation de défauts ponctuels tels que lacunes et atomes interstitiels. Au cours du temps, ces défauts migrent, se recombinent ou s'agglomèrent pour former des boucles interstitielles ou lacunaires de dislocation et des cavités. Les amas de défauts créés sous irradiation impactent fortement les ségrégations et précipitations des solutés constituant les alliages utilisés pour la cuve et ses composants internes. L'irradiation modifie notamment la microstructure et les propriétés mécaniques des aciers utilisés en les fragilisant. Prédire l'évolution microstructurale se produisant dans les aciers irradiés est un enjeu important d'un point de vue autant industriel que scientifique. Cette approche nécessite de pouvoir simuler la diffusion et les dynamiques d'agglomération des amas de défauts, lesquels sont aussi constitués d'éléments d'alliage mineurs.

Le travail envisagé dans la thèse a pour objectif d'estimer les propriétés de transport de défauts complexes à l'aide d'une méthode Monte Carlo cinétique et de techniques de réduction de variance. Les fréquences de transition de l'équation maîtresse régissant l'évolution du système sur son réseau cristallin seront calculées à partir des potentiels interatomiques et/ou des métamodèles disponibles dans la littérature. Des alliages complexes concentrés de type FeNiCr, modèles d'alliages à haute entropie (HEA), seront utilisés pour valider la méthode et calculer les coefficients de diffusion de chaque élément. Concernant la mobilité des amas stables de défauts, nous considérerons l'alliage faiblement allié FeNiCu pour lequel une paramétrisation a été développée par EDF, partenaire de cette thèse. Les grandeurs mesurées seront ensuite utilisées pour construire un modèle de substitution fournissant les taux de réaction et les forces de puits dans les équations de cinétique chimique gouvernant la dynamique des amas à une échelle mésoscopique supérieure. Ces équations seront simulées de manière stochastique à l'aide d'un algorithme de gestion de files d'attente des événements physiques élémentaires.

Contact - Manuel Athènes ☎ 01 69 08 37 69 ✉ [manuel.athenes@cea.fr](mailto:manuel.athenes@cea.fr)

---

Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives  
Institut des Sciences Appliquées et de la Simulation pour les énergies bas carbone  
Département de Recherche sur les Matériaux et la Physicochimie  
Service de recherche en Corrosion et Comportement des Matériaux  
Section de Recherches de Métallurgie Physique  
Centre de Saclay - Bât. 520 - 91191 Gif-sur-Yvette Cedex - France