

MINISTRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE  
SCIENTIFIQUE

UNIVERSITE EL-HADJ LAKHDAR BATNA  
FACULTE DES SCIENCES

DEPARTEMENT DES SCIENCES DE LA MATIERE



**MEMOIRE**

*Pour l'obtention du diplôme de*

**MAGISTER**

*EN PHYSIQUE*

**OPTION : Matériaux métalliques et semi-conducteurs**

*Présenté par*

**MOKRANE ABDELKADER**

*Thème:*

**Etude des matériaux métalliques sous  
irradiation. Dommages et effets.**

*Soutenu le :...../...../2013*

*Devant le jury compose de:*

BELGACEM- BOUZIDA Aissa	Prof.	Univ. Batna	Président
BOUHARKAT ADJADJ Fouzia	Prof.	Univ. Batna	Rapporteur
BELBACHA El-Djemai	Prof	Unv. Batna	Examineur
BAAZIZ Hakim	MCA	Univ. M'sila	Examineur
DJABALLAH Yacine	MCA	Univ. Batna	Examineur

Année universitaire : 2013/2014

# *Dédicace*

**A**

**Ma mère, Mon père, Ma femme, Mes enfants  
Youcef et Zakaria**

# *Remerciement*

Je remercie dieu le tout puissant de m'avoir donnée courage, patience et force durant toutes ces années d'étude.

Je tiens tout d'abord à exprimer toute ma gratitude à mes professeurs de physique et plus particulièrement mon encadreur **M<sup>me</sup> BOUHARKAT**, professeur à l'université de Batna pour l'aide qu'elle m'a apporté durant mon encadrement et de m'avoir permis d'accomplir ce travail dans les meilleures conditions.

Je remercie vivement Monsieur Aissa **BELGACEM BOUZIDA**, professeur à l'Université de Batna, qui m'a fait l'honneur de présider mon jury et juger mon travail.

Je tiens à témoigner ma grande reconnaissance à Monsieur **El-Djemai BELBACHA**, professeur à l'université de Batna pour avoir accepté de participer à ce jury et examiner mon travail.

J'adresse mes sincères remerciements à Monsieur **Hakim BAAZIZ**, maître de conférence à l'université de M'sila, pour avoir accepté de participer à ce jury et examiner mon travail.

Mes remerciements s'adressent également à Monsieur **Yacine DJABALLAH**, maître de conférence à l'université de Batna, d'avoir accepté d'examiner ce mémoire.

J'exprime toute ma reconnaissance envers tous ceux qui m'ont aidé par leurs encouragements et leurs conseils.

# Sommaire

Introduction générale .....1

## **Chapitre I : Revue bibliographique**

### **1<sup>ère</sup> Partie :Rappels cristallographique, structure des métaux et des alliages**

I-1-1-Introduction .....	5
I-1-2-arrangement structural des solides cristallins.....	5
I-1-2- 1 - le cristal parfait.....	5
I-1-2-2- le réseau cristallin.....	5
I-1-2-3- structure cristalline.....	8
I-1-2-4- formation des solides.....	8
I-1-2-4-1 – Solides ioniques.....	8
I-1-2-4-2 - Solides métalliques .....	9
I-1-2-4-3- Solides covalent.....	10
I-1-2-4-4- solides moléculaires.....	11
I-1-3- les défauts cristallines :.....	12
I-1-3-1- Introduction.....	12
I-1-3-2- Défauts ponctuels .....	12
I-1-3-3- Défauts linéaires .....	13
I-1-3-4- Défaut plans.....	14
I-1-3-4- Défauts à trois dimensions .....	16
I-1-4-Structure des métaux :.....	16
I-1-4-1 Généralités.....	16
I-1-4-2- Solidification des métaux .....	16
I-1-5-Structure des alliages.....	18
I-1-5-1 Généralités.....	18
I-1-5-2 Solutions solides ordonnées .désordonnées.....	19
I-1-6 Conclusion.....	21

### **2<sup>ème</sup> Partie : Interactions particules matières et défauts élémentaires**

I-2-1-introduction.....	23
I-2-2-physique des interactions particule-matière :.....	23
I-2-2-1-Les ions lourds :.....	23

I-2-2-2-Les neutrons :	25
I-2-2-3-Les électrons :	26
I-2-2-4-Les photons $\gamma$ :	27
I-2-3-Le transfert d'énergie cinétique et de quantité de mouvement	28
I-2-4- le taux de création de défauts :	32
I-2-5-l'évolution des défauts ponctuels au cours du temps :	35
I-2-5-1-les modes de recombinaison des défauts ponctuels	35
I-2-5-2-La disparition des défauts ponctuels sur les puits	35
I-2-5-3-L'agrégation des défauts ponctuels	36
I-2-6-conclusion	37

### **3<sup>eme</sup> partie : Dommages d'irradiations et microstructures**

I-3-1 introduction	39
I-3-2- L'évolution des défauts ponctuels	39
I-3-3-Formation de cavités et gonflement	39
I-3-4-Les boucles de dislocations	40
I-3-5-Les déformations induites par les boucles	41
I-3-6- Les transports atomiques accélérés par l'irradiation	42
I-3-7 - Les déplacements des équilibres thermodynamiques	44
I-3-8 - Les désordres induits par l'irradiation	45

## **Chapitre II :**

### **Applications aux alliages et composants des réacteurs**

II-1-introduction	48
II-2-application sur les alliages des constructions a base d'aluminium	48
II-3- application sur les alliages de cuivre	49
II-4-l'effet d'irradiation ionique sur les propriétés mécanique d'alliage TI-6AL-4V	52
II-5-effet d'irradiation dans les carbures pour les réacteurs du futur	53
II-6-application sur les cuves des réacteurs à eau pressurisée	54
II-6-1-description des cuves nucléaires	54
II-6-2-La fragilisation sous irradiation	56
II-7-application sur les aciers inoxydables	58

## Chapitre III :

### Méthodes numériques de calcul des dommages d'irradiations

III-1- introduction :	62
III-2- La modélisation des défauts	62
III-2- 1-La méthode de Kinchin-Pease	62
III-2- 2-La simulation monte-Carlo	63
III-2- 3-Le code TRIM	63
III-3-le phénomène de pulvérisation	64
III-4- Le phénomène de rétrodiffusion	67
III-5- simulation et Interprétation par le logiciel SRIM	68
III-5-1-le choix du système Fe-B	68
III-5-2-résultats de simulation et interprétation	69
III-5-2-1-L'étude de trajectoire on fonction de l'angle d'incidence	73
III-5-2-2-L'étude de la longueur de pénétration on fonction de flux	75
III-5-2-3-L'étude d'ionisation en fonction de l'angle d'incidence	78
III-5-2-4L'étude de nombre de défauts en fonction de l'angle d'incidence	81
III-5-2-5-L'étude de Profondeur de pénétration en fonction de l'énergie	82
III-5-2-6- L'étude de rétrodiffusion en fonction de l'énergie	82
III-5-2-7- L'étude Nombre des défauts créés en fonction de l'énergie	83
III-6-conclusion:	84
III-7-comparaisons avec l'étude expérimentale	85
III-7-1- Introduction	86
III-7-2- comparaison	86

# **Introduction générale**

## **Introduction générale**

Tous les matériaux qui nous entourent sont formés d'atomes et de molécules. L'arrangement et la relation qui existent entre ceux-ci expliquent certaines de leurs propriétés. Pendant longtemps, les physiciens, en se fondant sur l'apparence immédiate des corps qui nous entourent, ont distingué les états solide, liquide et gazeux.

Les solides sont des corps qui possèdent une certaine rigidité au cisaillement et généralement leur structure cristalline. Les cristaux sont caractérisés par une disposition régulière des atomes. Ils présentent une répétition rigoureuse des mêmes éléments de structure ou motif cristallin. Parmi eux les métaux et les alliages métallique qui ont des caractéristique et propriétés mécaniques bien définis.

Tout écart de la structure périodique des cristaux s'appelle défaut. Les défauts de structure influent sensiblement sur les propriétés des solides, telles que : la conductivité électrique, la dureté, la plasticité et la couleur des cristaux [1].

Les défauts cristallines dus a l'irradiation des cristaux par des particules rapides ou par les fragments de fission des noyaux et des ions accélérés constituent l'essentiel de l'étude que nous avons menée pour la réalisation de ce mémoire.

Les particules qui traversent le cristal provoquent des processus complexes parmi lesquels sont les collisions élastiques, les excitations électroniques et les transformations nucléaires [2].

En présence des flux de particules, les matériaux subissent des transformations variées (ionisation, transmutation, déplacements d'atomes, fission...), dont les conséquences sont une modification sensible de la microstructure et donc des propriétés d'emploi.

La technologie moderne exige, en effet, de plus en plus des matériaux qui résiste tous ces transformations notamment en technologie nucléaire, où l'on recherche certaines combinaisons optimales de propriétés physiques, ce qui nécessite l'étude sur des nouvelles bases des matériaux et de leurs propriétés, tant au point de vue théorique qu'au point de vue technologique.

La stabilité en présence des rayonnements Pour qu'un matériau puisse être utilisé dans un réacteur, il faut qu'il puisse résister, non seulement à des températures élevées, mais aussi à des flux intenses de rayonnements nucléaires pendant des périodes prolongées.

Ce travail est subdivisé en trois chapitres :

► Le premier chapitre est un rappel bibliographique sur le thème et pour ce faire, il a été subdivisé en trois parties : la première est un rappel sur la structure des métaux et alliages. La deuxième partie traite des interactions particules-matière et défauts élémentaires. Enfin, la troisième partie est consacrée aux dommages d'irradiation.

► Le deuxième chapitre est destiné à l'application des effets des radiations aux alliages métalliques et composants des réacteurs.

► En fin dans le troisième chapitre nous avons étudiés une méthode numérique de calcul des dommages d'irradiations par un logiciel adapté a ce type d'étude, il s'agit du logiciel SRIM qui permet de calculer les interactions électroniques et nucléaire, les pertes d'énergie et la profondeur de pénétration d'un ion de masse et d'énergie données.

# **Chapitre I : Revue bibliographique**

ère  
1 partie

**Rappel cristallographique,  
Structure des métaux et des  
alliages.**

### **I-1 -1-introduction**

Les solides sont des corps qui possèdent une certaine rigidité au cisaillement. Généralement leur structure est cristalline. Les cristaux sont caractérisés par une disposition régulière des atomes. Ils présentent une répétition rigoureuse des mêmes éléments de structure ou motif cristallin [1].

La classification actuelle des matériaux repose sur la structure atomique des matériaux et Dans certains cas les solides cristallins apparaissent sous la forme de monocristaux.

L'ordre tridimensionnel se manifeste alors par leur aspect géométrique : faces planes se coupant suivant des arêtes vives et faisant entre elles des angles bien déterminés.

Les cristaux sont des corps dans lesquels les particules qui les constituent sont disposées suivant une période rigoureuse en formant un motif cristallin.

### **I-1-2-arrangement structural des solides cristallins**

#### **I-1-2- 1 - le cristal parfait**

Le cristal idéal ou parfait est constitué d'une répartition régulière des atomes, des ions ou des molécules suivant les trois dimensions de l'espace et l'arrangement régulier des atomes s'étend pratiquement à l'infini.

A notre échelle, on a des macro cristaux caractérisés par leur aspect géométrique caractéristique :

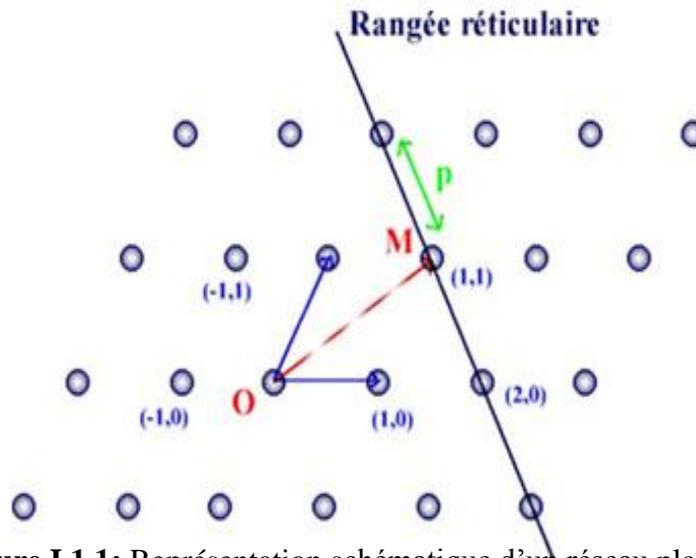
Faces planes, arêtes vives, angles entre les faces bien déterminés.

Un cristal peut être décrit à l'aide d'une entité mathématique, le réseau, et d'un contenu matériel, le motif. « L'assemblage » constitue le cristal.

#### **I-1-2-2 Le réseau cristallin**

Le réseau cristallin est un concept fondamental pour la description de tout solide qui spécifie l'ordre périodique dans lequel les unités élémentaires répétées sont disposées, donc c'est une entité mathématique. Ce n'est pas un cristal. C'est un ensemble de points qui n'a aucune matérialité [1].

L'ensemble des points M forme les nœuds du réseau, occupés ou non par des particules (Figure I.1.1)



**Figure I.1.1:** Représentation schématique d'un réseau plan [2]

Le réseau est défini par l'ensemble des points M, ceux-ci formant les nœuds du réseau, occupés ou non par des atomes. La localisation des nœuds est déterminée par un système vectoriel. Une rangée réticulaire est définie par une droite passant par minimum deux nœuds. P est appelé paramètre de la rangée réticulaire et correspond à la distance entre deux nœuds de la rangée réticulaire.

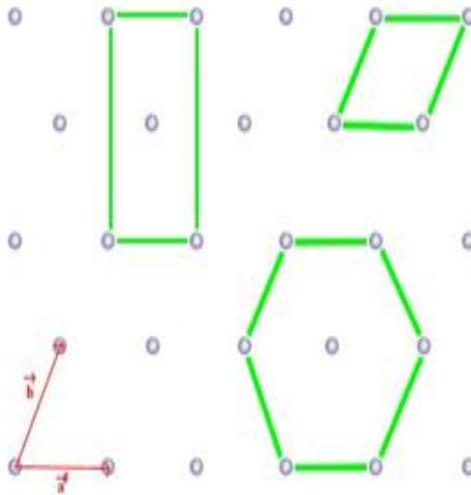
La Maille élémentaire = tout polyèdre ayant pour sommets des nœuds du réseau, et tel que l'empilement de polyèdres tous identiques au premier puisse remplir tout l'espace sans vide ni recouvrements de matière.

Pour compter le nombre de nœuds « contenus » dans une maille élémentaire, il faut tenir compte du fait que les sommets du polyèdre appartiennent simultanément à un nombre  $p$  de mailles adjacentes ; chacun d'eux comptera donc pour  $1/p$  nœud.

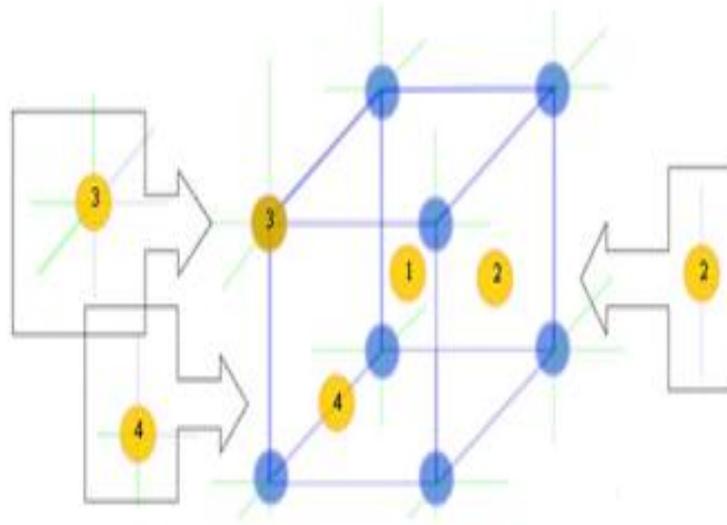
Il est possible de démontrer qu'une maille élémentaire contient toujours un nombre entier  $N$  de nœuds.- Décompte du nombre de nœuds (dans un réseau 3D, tel que dans la réalité) contenus dans une maille élémentaire (toujours un nombre entier) :

Si on considère un cube On peut compter les particules qui se trouvent dans une maille :

- (1) si un atome est dans la maille, il y est à 100% et il compte donc pour 1.
- (2) si l'atome est au centre de la face, une partie est dedans et l'autre est dehors : l'atome compte pour  $1/2$ .
- (3) si l'atome est centré sur le sommet, il compte pour  $1/8$  (Il y a 4 cubes au-dessus et 4 cubes au-dessous).
- (4) si un atome est au centre d'une arête, il compte pour  $1/4$  (Figure I.1.2).



**Figure I.1.2:** Exemple de mailles élémentaires [2].



**Figure I.1.3:** Densité des nœuds du réseau [2].

- (1) atome dans la maille (=1),
- (2) atome au centre de la face (=  $\frac{1}{2}$ ),
- (3) atome centré sur le sommet de la maille (=  $\frac{1}{8}$ ),
- (4) atome au centre d'une arête (=  $\frac{1}{4}$ ).

Types de réseaux cristallins : Jusqu'à présent, on a parlé du réseau mathématique. On passe maintenant au réseau cristallin.

Bravais (1848)[1] a montré qu'il y avait en fait 14 systèmes cristallins et tous les cristaux appartiennent à ces systèmes :

Système cubique :

- Système cubique simple : atomes présents uniquement aux points du réseau
- Système cubique centré (système CC) : il y a un atome supplémentaire au centre du cube.
- Système cubique faces centrées (système CFC) : chaque face comporte un atome au centre de celle-ci.
- Système hexagonal : le système hexagonal peut se décomposer en prismes à base losangique.
- Système orthorhombique : simple, à 2 faces centrées, à faces centrées, à prismes centrés.
- Système monoclinique: simple, à faces centrées
- Système rhomboédrique : 1 seul système.
- Système quadratique : simple, centré.
- Triclinique : 1 seul système.

### **I-1-2-3 Structure cristalline**

Le cristal est constitué soit d'atomes, soit d'ions a charge positive et négative extrêmement petites sollicitées par des forces d'attraction et de répulsion mutuelles, donc c'est un empilement spatial de telles atomes ou ions [3].

Le motif constitue le contenu matériel du cristal, ou les constituants élémentaires du motif peuvent être de différents types, correspondant à différentes catégories de cristaux.

### **I 1-2-4 formations des solides**

Les solides peuvent être classés en fonction des liaisons qui lient les atomes et les molécules entre eux. Cette classification permet de déterminer des solides ioniques, métalliques, covalents et moléculaires.

#### **I-1-2-4-1 Solides ioniques**

La structure cristalline des solides ioniques est régie par deux facteurs relativement simples

- les ions sont entourés par des champs électrostatiques non directionnels :

(1) Formation d'un réseau tridimensionnel régulier, énergétiquement bénéfique, entre les ions chargés positivement et négativement.

(2) puisque les charges de mêmes types se repoussent, elles ne peuvent pas venir au contact l'une de l'autre.

Les ions chlorures, nitrures et oxydes des métaux sont les groupements de base des

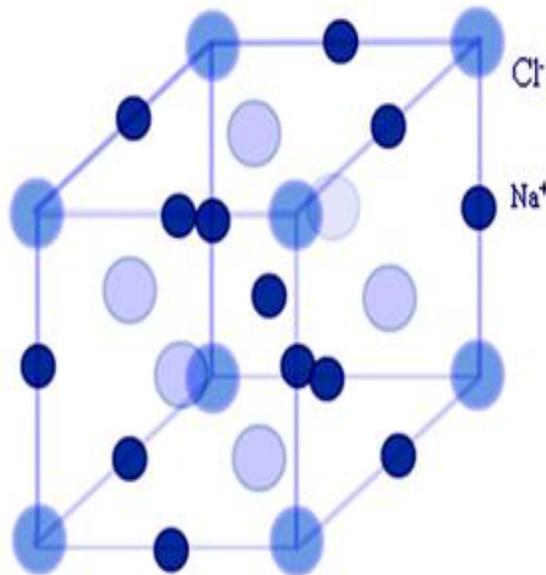
matériaux connus comme étant les céramiques, dans lesquels se trouvent les verres. Ces matériaux sont très stables grâce à leurs très fortes liaisons ioniques.

(Ex : Chlorure de sodium) (Figure I.1.4).

L'ion  $\text{Na}^+$  est plus petit que l'ion  $\text{Cl}^-$ . Il faut que l'ensemble du cristal reste électriquement neutre, il y a donc un ion  $\text{Na}^+$  pour un ion  $\text{Cl}^-$  et le centre de la maille est occupé par un ion  $\text{Na}^+$  [3].

Les particularités principales des cristaux ioniques c'est la résistivité électrique qui a des valeurs élevée a la température ordinaire, et aussi dans le domaine visible du spectre électromagnétique la plus part des cristaux ioniques sont transparents.

Au sein des cristaux ioniques l'attraction est surtout conditionnée par l'interaction coulombienne des ions chargés. Les a charges opposées sont également sollicités par une répulsion due au charges de même signe et de l'action du principe d'exclusion de Pauli, chaque ion possédant des configurations électroniques stables des gaz inertes a couches saturées.



(Figure I.1.4): Structure cristalline du NaCl - Structure cubique face centrée (CFC) [2].

#### I-1-2-4-1- Solides métalliques

Un arrangement similaire à celui des solides ioniques est possible avec la liaison métallique. Les atomes ont de faibles électronégativités et par conséquent, les électrons sont délocalisés entre tous les atomes.

les métaux sont constitués d'ions positifs immergés dans un « gaz électroniques », la cohésion de l'ensemble résultant de la liaison métallique.

Le gaz d'électrons étant réparti de façon plus ou moins homogène dans le cristal, c'est en fait la répartition des ions positifs, que l'on désignera dans la suite par « atomes » pour simplifier, qui caractérise la structure du cristal métallique.

Le motif d'un cristal métallique est donc les atomes contenus dans une maille élémentaire, le cristal résultant de la répétition tridimensionnelle de ce motif suivant les translations du réseau associé.

Le nuage électronique forme la base des métaux. Les trois structures les plus fréquentes dans les métaux sont les structures cubiques centrées (CC), cubiques à faces centrées (CFC) et hexagonales compactes (HC).

#### **I-1-2-4-1 - Solides covalents**

A l'opposé des solides ioniques et métalliques, ici, la liaison est fortement directionnelle et cette directionnalité provoque des fortes contraintes sur les arrangements possibles entre les atomes.

Il n'y a que quelques cas dans lesquels les atomes d'un même élément se lient par liaison covalente pour former un solide ; Ceux-ci sont le carbone, le silicium et le germanium. Un exemple de solide à liaison covalente est le diamant, qui est formé de carbone. Le carbone présente un arrangement des électrons sur la couche externe tel qu'il nécessite quatre électrons supplémentaires pour obtenir une configuration similaire au néon.

Dans le cas du diamant, c'est acquis par partage des électrons des atomes de carbone voisins. La direction de ces liaisons est telle qu'elles sont dirigées vers les quatre coins d'un tétraèdre ayant le noyau d'un atome de carbone en son centre.

Les solides covalents constitués d'un seul élément sont très rares.

Les liaisons covalentes sont plus habituellement formées entre des éléments différents où chacun prend la configuration d'un gaz rare.

Lorsque ces éléments ont réagi pour former ces liaisons, la molécule créée devient hautement non réactive envers les molécules du même type, et ceci ne produit pas la base pour la formation d'un réseau tridimensionnel.

De ce fait, les éléments liés par liaison covalente sont des molécules stables, et la plupart de ces éléments sont des gaz ou des liquides (ex. eau, oxygène, hydrogène).

Pour que l'eau solidifie à 0°C, il faut qu'il y ait d'autres liaisons que cette liaison covalente

primaire, ce sont des liaisons secondaires (liaisons hydrogènes).

#### I-1-2-4-2 - Solides moléculaires

Une des conséquences du partage des électrons par deux ou plusieurs noyaux atomiques est la position préférentielle des électrons au voisinage d'une partie de la molécule.

Par conséquent, la molécule acquiert une charge positive à une de ses extrémités et une charge négative à l'autre extrémité, résultant en un dipôle électrique.

Ces dipôles permettent des interactions entre les molécules et la formation de liaisons secondaires.

Il est possible de créer une grande variété de molécules, certaines peuvent être solides à température ambiante.

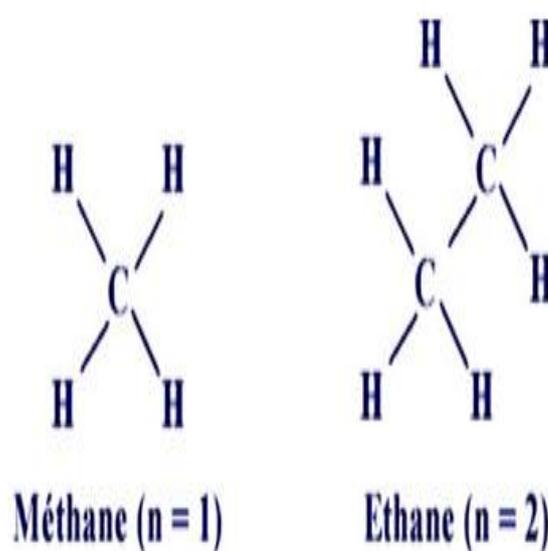
Si les molécules sont suffisamment grandes, elles sont liées ensemble par de nombreuses interactions de dipôles.

La faible force de liaison signifie que certains solides auront une température de fusion très basse, et la limite supérieure pour des molécules solides est d'approximativement 100°C.

La meilleure façon pour apprécier la manière dont ces solides sont formés est à travers un groupe de molécules connu sous le nom d'alkanes linéaires. Ceux-ci sont basés sur une chaîne linéaire d'hydrates de carbone, avec comme formule générale  $C_nH_{2n+2}$ , où  $n$  est un nombre entier positif.

La plus simple d'entre elles est le méthane ( $CH_4$ ), qui a  $n = 1$  (Figure I.1.5).

Si on enlève un hydrogène de chacune de 2 molécules de méthane et qu'on relie ces molécules par une liaison carbone-carbone, on obtient l'éthane (Figure I.1.5).



**Figure I.1.5 :** Les deux 1ers membres de la famille des alcanes : le méthane ( $n=1$ ) et l'éthane ( $n = 2$ ) [2].

On peut continuer ce processus et obtenir de très larges molécules. Lorsque le nombre de groupements – CH<sub>2</sub> - devient très important, il y a très peu de changement dans les propriétés de ces matériaux, qui sont connus sous le nom de polyméthylène. Ce nom est dérivé du mot poly- (signifiant beaucoup) et de l'unité structurale sur laquelle il est basé, le méthylène. Un matériau ayant ce type de structure est connu sous le nom de polymère, puisqu'il consiste en la répétition nombreuse d'unités appelées (mères).

### **I-1-3- Les défauts cristallines**

#### **I-1-3-1 introduction**

Tout écart de la structure périodique d'un cristal s'appelle défaut ou imperfection, donc les cristaux comportent des défauts (défauts de réseau) même s'ils sont peu nombreux. Ces défauts ont une importance considérable puisqu'ils déterminent un grand nombre de propriétés importantes des solides cristallins, telles que les propriétés plastiques, la conductivité électrique, la photoconduction, la luminescence, et la couleur des cristaux [3].

Il existe quatre sortes de défauts cristallins : défauts ponctuels, défauts linéaires, défauts plans et défauts à trois dimensions.

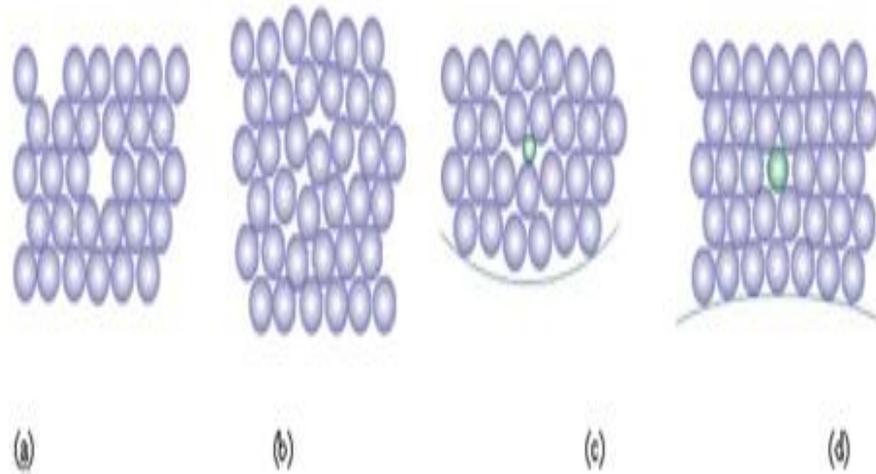
#### **I-1-3-1- Défauts ponctuels**

Les défauts ponctuels sont des perturbations de la structure localisées aux points isolés du cristal, donc c'est un défaut autour d'un point, mais les voisins sont également perturbés.

Aux défauts ponctuels on rapporte les lacunes, les atomes dans les interstices, les atomes des impuretés dans les nœuds [1].

Le mécanisme de l'apparition des défauts ponctuels a été décrit la première fois par Y.Frenkel, les atomes du cristal peuvent sous l'action de l'échauffement acquérir une énergie cinétique suffisante pour se déplacer et sortir de sa position d'équilibre et en transmettre l'énergie aux autres atomes. Si tous les nœuds voisins du réseau sont occupés, il ne peut se loger que dans un interstice. Le nœud du réseau resté vacant a reçu le nom lacune (Figure I.1.6).

Les défauts de Frenkel apparaissent plus facilement dans les cristaux à de grands intervalles interatomiques que dans les empilages compacts, on découvre des interstitiels dans les métaux à réseau cubique à face centrées, ou les interstitiels sont des petites atomes d'impureté tels que le bore, le carbone, l'azote [3].



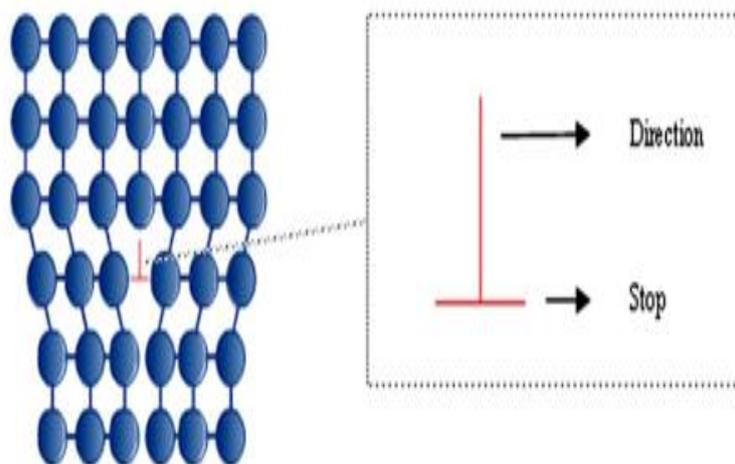
**Figure I.1.6:** Exemples de défauts ponctuels dans les solides cristallins

(a) lacune, (b) auto-interstitiel, (c) hétéro-interstitiel, (d) atome de remplacement (solution solide de substitution) [3].

### I-1-3-2- Défauts linéaires

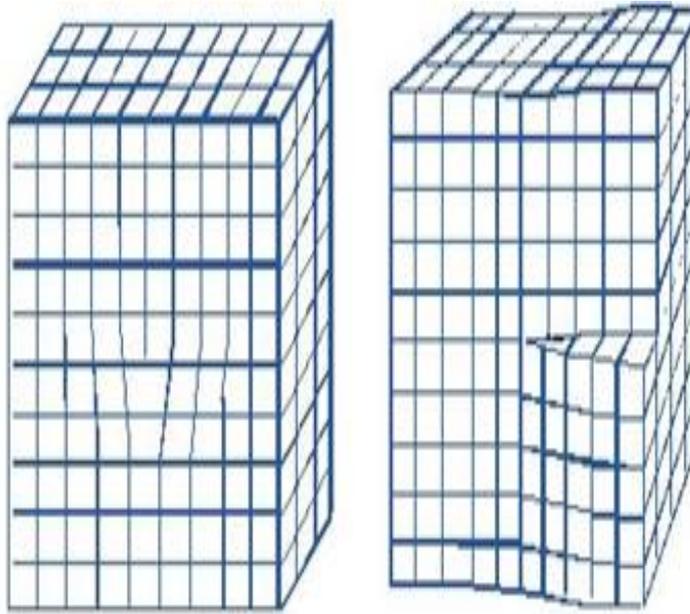
Les défauts linéaires concernés ici sont appelés dislocations. Elles sont caractérisées par la perturbation de la périodicité s'étendant dans une direction à une distance beaucoup plus grande que le paramètre du réseau. Il en existe de deux types : la dislocation coin et la dislocation vis.

Une dislocation coin correspond à la présence d'un demi-plan atomique inséré dans le réseau cristallin qui se termine par une ligne de dislocation (ligne de dislocation perpendiculaire à la feuille, signalée par un T). Tout se passe comme si la rangée était une rangée supplémentaire qui s'enfonce dans le cristal, d'où l'origine du nom « coin ».



**Figure I.1.7:** Représentation schématique d'une dislocation coin [2].

Une dislocation vis transforme l'ensemble des plans atomiques qui lui sont perpendiculaires en une rampe hélicoïdale (lorsqu'on parcourt le circuit autour d'une dislocation, on se retrouve une marche « plus haut » ou « plus bas ». C'est le résultat d'un mouvement de cisaillement (Figure I.1.8).



**Figure I.1.8:** Représentation schématique d'une dislocation coin (a) et d'une dislocation vis (b) [2].

Cette déformation est définitive (déformation plastique). C'est grâce à ces mouvements que la déformation plastique des matériaux peut se produire. Les dislocations jouent donc un rôle primordial dans les propriétés mécaniques des matériaux. Le déplacement s'arrête lorsqu'il arrive au « bord » du cristal (joint de grains). Le joint de grains est donc un piège à dislocation.

### I-1-3-3- Défauts plans

Les défauts à deux dimensions comprennent les joints de grains, les macles, les sous-joints et les parois d'antiphase.

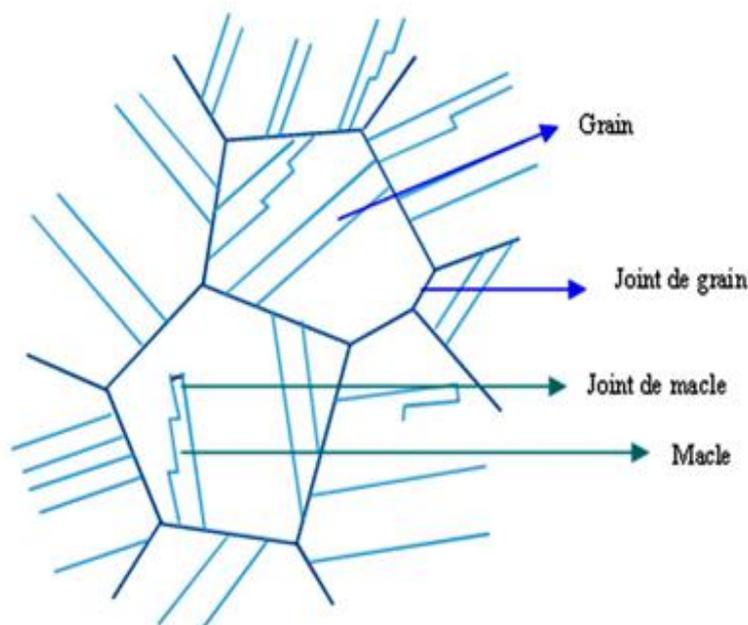
Un joint de grains est, par définition, la surface qui sépare deux monocristaux d'orientations différentes dans un agrégat poly cristallin. En réalité, c'est plutôt une région assez désorganisée, de largeur non négligeable (de l'ordre de 2 à 3 distances interatomiques). Elle joue le rôle de barrière au mouvement des dislocations et peut en émettre dans certaines conditions [3].

Les joints de grains sont des pièges à dislocation mais ce sont aussi des sources de dislocations. Par conséquent, les joints de grains interviennent dans les problèmes de déformation plastique et dans les mécanismes de durcissement et aussi dans la conductivité électrique.

Les macles sont des défauts dans l'ordre d'empilement des couches denses d'atomes. Une macle est une partie d'un grain symétrique du reste du grain (ou cristal mère) par rapport à un plan cristallographique. Le joint de macle sépare deux parties du grain d'orientation symétriques [3].

Au cours de la solidification d'un métal liquide ou de la recristallisation d'un solide, l'ordre des plans peut s'inverser : par-dessus une couche A, par exemple, il y aura une couche C au lieu d'une couche B, ce qui produit une faute d'empilement.

L'empilement global des couches devient alors CABACBAC ... Le plan A est le plan de maillage, et la partie maillée du cristal (CBAC ...) est l'image miroir de la partie non maillée, le plan de maillage faisant office de plan miroir. Les défauts d'empilement ont des incidences sur les propriétés mécaniques.



**Figure I.1.9:** Représentation schématique des macles et des joints de grains [2].

#### **I-1-3-4- Défauts à trois dimensions**

On a un défaut à trois dimensions quand une partie du cristal est remplacée par un volume d'un composé différent ; la différence est de nature chimique et peut ou non être accompagnée des différences cristallographiques. La partie étrangère du cristal est soit un précipité, soit une inclusion.

Les précipités sont des petites particules de seconde phase qui se sont formées entre le métal de base et un élément d'alliage.

Les inclusions sont des «impuretés » dans le métal, qui proviennent de son élaboration à l'état liquide ; ce sont le plus souvent des oxydes, des sulfures ou des silicates. La taille des précipités et la distance entre eux ont une très grande influence sur les propriétés mécaniques.

#### **I-1-4-structure des métaux**

##### **I-1-4-1-introduction**

Les métaux représentent  $2/3$  des éléments du tableau périodique et environ 24% de la masse de la planète. Ce qui distingue les métaux des non métaux est leurs liaisons interatomiques.

La plupart des métaux comme la plupart des solides ont des structures cristallines cubiques (CC et CFC) ou hexagonales (HC).

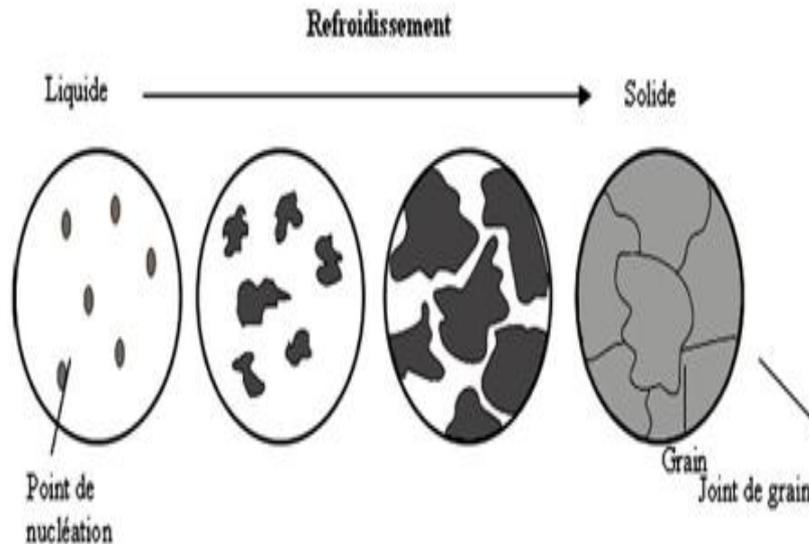
##### **I-1-4-2 solidification des métaux :**

La plupart du temps, lorsqu'un matériau solidifie, de nombreux cristaux se forment dans le liquide et un solide poly cristallin (plusieurs cristaux) se forme. Le moment où le cristal commence à croître est appelé nucléation et le point où il se produit le point de nucléation.

A la température de solidification, les atomes du liquide, commencent à se lier entre eux aux points de nucléation et à former des cristaux.

Très souvent, la solidification est initiée par la présence d'impuretés dans le liquide. Lorsque la température diminue, les atomes vont se déposer sur les impuretés et le cristal va commencer à se former. Ce processus est appelé nucléation hétérogène.

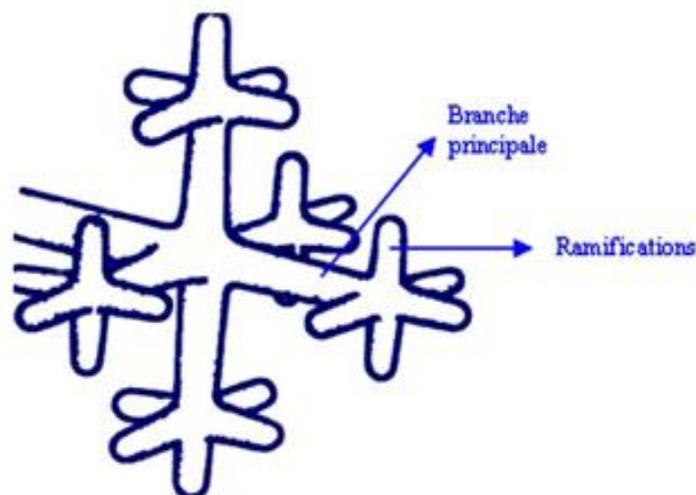
Les tailles finales individuelles des cristaux dépendent du nombre de points de nucléation. La taille des cristaux augmente par l'addition progressive d'atomes et croisse jusqu'à ce qu'il touche le cristal voisin en formation.



**Figure I.1.10:** Solidification d'un métal par nucléation hétérogène [2].

Le cristal est appelé grain et les joints entre les cristaux, joints de grains. La zone du joint de grain est formée d'atomes qui n'ont pas de structure cristalline (zone désordonnée). Un refroidissement rapide ou la présence d'un plus grand nombre d'impuretés (on peut en ajouter volontairement) résultera en un plus grand nombre de points de nucléation et par conséquent, de grains de plus petites tailles (structure à grains fins). Un refroidissement lent résultera généralement en des grains plus grands.

Dans les métaux, les cristaux se formant lors du refroidissement suivent généralement un schéma de solidification qui consiste en une branche principale et de multiples ramifications. Le cristal ressemble à un pin et est appelé dendrite. La forme dendritique apparaît parce que les cristaux croissent selon des plans définis suite au treillis qu'ils créent.



**Figure I.1.11:** Représentation schématique d'une dendrite [2]

## **I-1-5- structure des alliages**

### **I-1-5-1-introduction**

Les métaux consistent en agrégats d'atomes régulièrement arrangés en structure cristalline. Les métaux ne se solidifient pas habituellement en un seul cristal, mais sont formés d'une multitude de petits cristaux.

Les alliages des métaux utilisés sont obtenus par cristallisation de deux ou de plus de deux métaux, parfois avec des inclusions d'éléments non métalliques. Un alliage est constitué d'un nombre de phases solides distinct. Chaque phase a sa propre structure et ses propriétés associées.

Alliage  $\neq$  mélange (ex. mélange de deux poudres d'or et de cuivre – on a toujours du cuivre et de l'or).

Alliage = solide obtenu par cristallisation d'un mélange de au moins 2 métaux liquides. Après solidification, on obtient un solide poly cristallin et dans ce réseau, on va trouver des atomes des deux métaux (ex : AuCu).

Lorsque deux éléments sont « mélangés », le matériau résultant peut être un alliage à une phase ou un alliage à plusieurs phases. Celui qui est formé dépend de la solubilité d'un des éléments dans l'autre, et ceci est gouverné par la nature cristalline des éléments et par leurs tailles relatives.

Il y a essentiellement trois phases différentes qui peuvent former un alliage : un métal pur, une solution solide ou un composé intermétallique : Que ce soit en métallurgie, ou en dentisterie ou autre, on n'utilise jamais de métal pur (Exception en dentisterie : procéder d'aurification = dépose d'or pur dans des petites cavités – abandonné actuellement).

Une solution solide est un mélange d'éléments à l'échelle atomique, et c'est analogue à un mélange de liquides qui sont solubles l'un dans l'autre.

Il a deux types de solutions solides :

Solution solide de substitution et solution solide d'insertion.

La solidification d'un mélange liquide de deux métaux purs A et B (ou d'un métal et d'un élément non métallique) est un processus complexe, dont l'analyse peut se faire à l'aide des diagrammes de phases.

Un alliage binaire AB est généralement constitué à l'état solide d'un agrégat d'une ou plusieurs espèces de cristaux, il est alors qualifié respectivement de monophasé ou de biphasé.

Les cristaux sont eux mêmes formés de mélanges des deux espèces atomiques A et B, appelés solutions solides.

Les solutions solides d'insertion peuvent être formées d'atomes hétérointersticiels (impuretés) donc de défauts ponctuels ou d'éléments d'addition.

Les solutions solides de substitution peuvent être formées d'atomes de remplacement non voulu (atome étranger de substitution) donc de défauts ponctuels ou d'atomes de remplacement voulu alliage.

. Règle des structures électroniques (ou effet de valence ou effet d'affinité chimique) : les métaux électroniquement semblables peuvent former des solutions étendue en raison de la similitude de leur liaison.

. Règle des valences :

S'ils ont la même valence, ils vont se dissoudre facilement mais les métaux de faible valence dissolvent davantage un métal de valence semblable que ceux de valence élevée.

. Règle des structures :

La structure est déterminée en grande partie par les forces de liaison, il en résulte que des structures semblables présentent une grande intersolubilité plutôt que celles de structure différente.

Si tous les facteurs sont favorables, on observe le plus souvent une intersolubilité complète, c'est-à-dire une solution solide quelle que soit la concentration (solution solide illimitée). C'est le cas de l'or et du cuivre.

Dans le cas contraire, on a une solubilité restreinte (solution solide limitée). On aura des domaines de concentration très étroits.

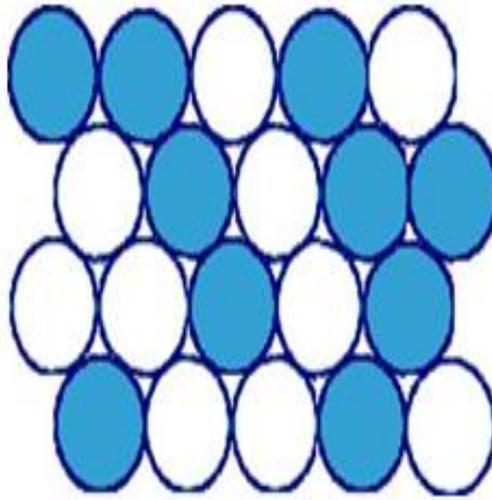
(Ex : on aura des solutés ne dépassera pas 3 à 7%. Dès qu'on en mettra plus, le 2ème cristal n'apparaîtra.

### **I-1-5-2- solutions solides ordonnées et désordonnées**

Deux types de solutions solides de substitution peuvent être distingués :

Dans les solutions désordonnées (Figure I.1.12), les sites de A occupés par des atomes de B sont répartis au hasard.

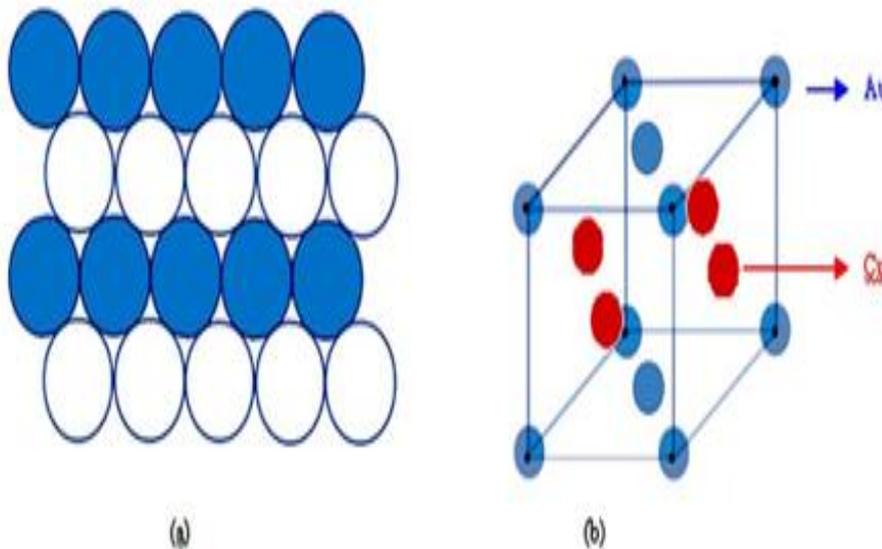
A l'opposé, dans les solutions ordonnées (Figure I.1.13), les atomes de soluté B sont répartis de façon régulière. On a un cristal, donc les atomes sont placés régulièrement dans les sites.



**Figure I.1.12:** Représentation schématique en 2 dimensions d'une solution solide (HC) désordonnée [2].

Ex : Alliage Au-Cu à 50% (concentration atomique). Ce ne sont pas des formules chimiques. C'est une proportion mais qui ressemble à une formule chimique, les 2 métaux cristallisent dans le système CFC. Le diamètre du Cu est de 255.1pm.

Au-dessus de 450°C, les atomes d'Au et de Cu sont répartis au hasard aux sommets et au centre du cube.



**Figure I.1.13:** Représentation schématique d'une solution solide ordonnée (a) en 2 dimensions (HC) - (b) en 3 dimensions (CFC) : Au-Cu [2].

Solution solide ordonnée = superstructure. Le passage de l'état ordonné à l'état désordonné se fait par changement de température, suffisamment longtemps.

- Les phases intermédiaires (composés intermétalliques)

Lorsque l'alliage existe en une proportion très simple qui ressemble à une formule chimique, on observe également une solubilité limitée. Ces solutions solides forment des composés intermédiaires avec une stœchiométrie (composition atomique) définie. On parle dans ce cas de phases ou composés intermédiaires (ou composés intermétalliques dans le cas des métaux).

Il existe :

- Ceux qui ont le caractère de l'état métallique (conducteurs de la chaleur, de l'électricité et qui sont malléables).

Un corps est dit malléable lorsqu'il peut subir une importante déformation plastique à la compression (ex : le fer à cheval, le fer forgé).

Ex : Cu-Zn et certaines phases de l'alliage utilisé dans l'amalgame dentaire :  $\text{Ag}_3\text{Sn}$  ou  $\text{Cu}_6\text{Sn}_5$ .

-Ceux qui ont un caractère métallique peu marqué : Ils ont un domaine d'existence moins étendu, une structure cristalline complexe. Ce sont des liaisons hétéropolaires (et non plus métalliques).

Ex :  $\text{ZnS}$ ,  $\text{Mg}_2\text{Si}$  qui sont des composés intermétalliques mais qui ont très peu le caractère métallique.

### **I-1-6-conclusion**

Nous avons donné dans cette première partie un rappel cristallographique et sur les états de la matière, en se insistant plus particulièrement sur l'état solide en considérant la structure des métaux et alliages. La deuxième partie sera dédiée aux interactions particule-matière et défauts élémentaires.

# **Chapitre I : Revue bibliographique**

## **2<sup>ème</sup> partie**

**Interactions particules matières et défauts élémentaires.**

### **I-2-1-introduction**

En présence des flux de particules, les matériaux subissent des transformations variées (ionisation, transmutation, déplacements d'atomes, fission...), dont les conséquences sont une modification sensible de la microstructure et donc des propriétés d'emploi. Les modes de création de ces défauts et leurs mécanismes d'évolution dépendent fortement du type de matériau (céramique, polymère, métal...) [4].

### **I-2-2-physique des interactions particule-matière**

#### **I-2-2-1-Les ions lourds**

Les ions de forte charge et très énergétiques, dits ions lourds, ont des processus d'interactions complexes avec la matière.

Ce sont Les produits de fission dans les combustibles nucléaires avec des masses centrées respectivement sur 95 et 140 unités de masse atomique (UMA). Leurs énergies cinétiques sont environ égales à 100 et 70 MeV. La quasi-totalité de l'énergie nucléaire récupérable provient de l'énergie cinétique de ces deux produits de fission [4].

Deux types principaux d'interactions sont activés selon leur vitesse propre, c'est-à-dire selon leur énergie.

Au début de leur parcours, l'énergie de ces ions lourds est élevée et leur vitesse est commensurable avec la vitesse des électrons du cortège de chaque atome.

Il y aura un freinage électromagnétique qui donne lieu à une très forte ionisation sur le parcours suivi par ces ions. Donc une interaction essentiellement avec les électrons.

Ce freinage électromagnétique ne conduit que très rarement à des dommages observables dans les métaux, mais fréquemment dans les oxydes ou les céramiques.

Leur mode de formation est encore objet de discussions et fait intervenir des mécanismes de répulsion coulombienne ou le développement d'une pointe thermique sur le parcours.

La perte d'énergie Lors de ce freinage électromagnétique, dépend de la vitesse réduite de l'ion incident, à comparer avec la vitesse des électrons de l'atome cible, de numéro atomique  $Z_2$ . Pratiquement, on compare la vitesse de l'ion à celle de l'électron 1s de l'atome d'hydrogène isolé :  $v_e = \approx 2,2 \cdot 10^6 \text{ m s}^{-1}$ .

Pour les fortes énergies (vitesse de l'ion incident  $v_i \gg Z^{2/3} v_e$ ), où l'atome incident a perdu tous ses électrons et peut être considéré comme un ion de charge ponctuelle égale à  $Z_1 e$ , la perte d'énergie le long du parcours, diminue avec l'énergie de l'ion ainsi qu'exprimé dans

l'approximation non relativiste de la formule de Bethe :

$$\left(\frac{\partial E}{\partial x}\right)_{\text{elect}} = (N\pi z_1 e^4 / m_e v_i) \ln (2m_e v_i / \ell)$$

Où :

N est la densité atomique.

$\ell$  le potentiel moyen d'ionisation des atomes de la cible.

$Z_1$  le nombre atomique de l'ion incident.

$m_e$  la masse d'électron.

$v_i$  la vitesse de l'ion incident.

Aux énergies intermédiaires des ions incidents, il y a compétition entre les processus d'ionisation et de capture des électrons. L'ion n'est plus totalement épluché. Sa charge étant plus faible, le pouvoir d'arrêt devient inférieur à celui décrit par la formule de Bethe.

Pour les faibles énergies ( $v_i \ll Z_1^{2/3} v_e$ ), on doit considérer les interactions entre les électrons des atomes cible et incident, leurs nuages respectifs se recouvrant pour former une quasi-molécule, avec un réarrangement temporaire des orbitales électroniques, au cours de l'interaction.

La perte d'énergie croît linéairement avec la vitesse de l'ion. L'approche de Lindhard et Scharff [4] est la plus classique :

$$\left(\frac{\partial E}{\partial x}\right)_{\text{elect}} = -8\pi e^2 a_0 N z_1 (z_1 z_2 v_e) / (z_1^{2/3} z_2^{2/3} v_e)^{3/2}$$

Où :

$$a_0 = h/mc^2 \sim 5 \cdot 10^{-11} \text{ m.}$$

$Z_2$  le nombre atomique de l'atome cible.

$Z_1$  le nombre atomique de l'ion incident.

$v_e$  la vitesse de l'électron.

N est la densité atomique.

En fin de parcours, pour des énergies bien plus faibles, l'interaction entre l'ion incident et les atomes de la cible conduit à des chocs dits nucléaires (ou élastiques).

**I-2-2-2-Les neutrons :**

On peut déclencher des réactions nucléaires complexes pour les très fortes énergies de neutrons, largement supérieures au MeV, en ayant induit une forte distorsion du noyau.

Il s'agit de la fission qui conduisant à une émission importante de neutrons à partir d'un seul neutron incident. C'est la réaction fondamentale qui justifie l'utilisation des réacteurs nucléaires [5].

Après capture du neutron (rapide ou thermique), un noyau fissile devient instable et se sépare en deux ions, les produits de fission et quelques neutrons.

Les réactions de type  $(n,\alpha)$  conduisent à la formation in situ d'atomes d'hélium. Ces réactions ont lieu sur des atomes variés, que ce soit sur le nickel pour les neutrons rapides, sur le bore pour les neutrons thermiques ou selon un processus en deux étapes sur le nickel pour les neutrons thermiques.

L'hélium étant totalement insoluble dans les matériaux, la formation de ce gaz conduira à des distorsions importantes, qui seront éventuellement compensées par une précipitation de bulles de gaz.

De même, l'aluminium se transforme par capture en silicium. Cet élément étant insoluble dans l'aluminium, il va modifier la métallurgie de ces alliages.



Il y a lieu aussi de noter les réactions de capture conduisant à une transmutation. Ainsi en neutrons thermiques, la capture de neutrons par le silicium permet de doper des lingots de silicium en phosphore et de disposer ainsi de lingots de semi-conducteurs dopés à résistivité particulièrement uniforme.



Lors d'une interaction élastique entre un neutron d'énergie incidente  $E_n$  et une particule cible au repos de masse  $m_c$ , généralement le noyau d'un atome, il y a transfert de quantité de mouvement et d'énergie cinétique entre le neutron et l'atome cible. L'énergie transmise

maximale est égale à  $T_{max}$  :

$$T_{max} = 4m_n m_c E_n / (m_n + m_c)^2$$

Où :

$m_n$  la masse du neutron.

$m_c$  la masse du cible.

$E_n$  l'énergie du neutron.

Et la valeur moyenne de  $T_{max}$  correspond à la moitié de la valeur maximale. Ainsi, un neutron de 100 keV transmet à un atome d'aluminium en moyenne 7 keV.

Pour ces énergies transmises, il sera facile de mettre en mouvement l'atome et de le faire sortir de son site cristallin. Il y aura création au moins d'un site vacant, une lacune, et d'un interstitiel.

### I-2-2-3-Les électrons

Les électrons réagiront avec les électrons des cortèges de chaque atome Par leur champ électromagnétique propre, induisant des ionisations. Il y a partage des énergies entre l'électron incident et l'électron éjecté. Peu à peu, l'énergie cinétique des électrons se dégrade [6].

Les électrons peuvent aussi interagir avec les ions, les noyaux des atomes. Il y a transfert d'énergie cinétique  $T_{max}$  et de quantité de mouvement selon l'approximation relativiste

$$T_{max} = 2E_e (E_e + 2m_e c^2) / m_c c^2$$

Où :

$T_{max}$  est l'énergie transmise maximale.

$E_e$  l'énergie incidente de l'électron.

$m_e$  masse de l'électron.

$m_c$  celle de l'atome cible.

$c$  la vitesse de la lumière.

Ainsi, un électron de 100 keV va transférer une énergie de 8,9 eV sur un atome d'aluminium, cette énergie est trop faible pour déplacer l'atome d'aluminium hors de son site dans le réseau cristallin.

Par contre, si l'énergie transmise est supérieure à une énergie minimale, il y a possibilité de déplacer l'atome hors de son site cristallin. On induira ainsi un dommage d'irradiation. Cette capacité de déplacer les atomes à l'aide d'électrons assez énergétiques (d'énergie supérieure à quelques centaines de keV) [7].

On va utilisée pour quantifier l'énergie minimale nécessaire pour déplacer un atome hors de son site  $E_d$  énergie seuil de déplacement.

La connaissance de  $E_d$  est en effet importante pour la compréhension du développement de dommage et la formation des défauts ponctuels dans les matériaux.

#### **I-2-2-4-Les photons $\gamma$ :**

Il ya des variétés réactions entre les matériaux et les photons dont la nature dépend fortement de l'énergie de ces photons, ainsi que de la densité électronique des matériaux Où se localise l'interaction.

Les photons proviennent toujours de réactions nucléaires, telles que la fission, la capture de neutrons avec réorganisation du noyau et émission de  $\gamma$  généralement de très forte énergie, ou la décroissance des produits de fission ou des produits d'activation.

Notons tout d'abord les réactions nucléaires particulières, dites réactions à seuil, comme les réactions  $(\gamma, n)$ .

Les réactions  $(\gamma, n)$  est par exemple utilisé pour déclencher la réaction nucléaire en chaîne, la réaction de fission.

Dans les réacteurs de puissance, on déclenche la réaction nucléaire en produisant un flux de neutrons par réaction  $(n, \alpha)$  sur l'antimoine. Toutefois, ce type de réaction est relativement rare, il ne sera pas considéré ultérieurement.

Pour les plus faibles énergies des photons, il y aura formation de photoélectrons : la totalité de l'énergie du photon est intégralement transmise à l'électron, qui est éjecté de son orbite.

Pour les énergies plus faibles, il s'agira des électrons périphériques, pour des énergies intermédiaires, d'électrons de couches plus profondes, ce qui conduira à avoir des absorptions pour les énergies caractéristiques des X.

Pour les énergies de photons  $\gamma$  intermédiaires, il y a interaction avec les électrons des atomes pour donner naissance à un électron Compton. Une partie de l'énergie du photon est transférée à cet électron, la partie résiduelle se traduit par un photon de plus faible énergie. Cette interaction est dite inélastique.

Lorsque les photons ont une très forte énergie, supérieure à quelques MeV, on peut obtenir une réaction de matérialisation. Le photon disparaît et se transforme en une paire (électron + antiélectron), dont la masse unitaire est égale à 512 keV [7].

L'énergie du photon  $E_\gamma$  sert d'une part à former la masse de ces deux particules, et d'autre part à leur donner une énergie cinétique. L'énergie cinétique de l'électron ou de l'antiélectron est donc égale à :

$$E_e = 1/2 (E_\gamma - 1,02) \text{ MeV.}$$

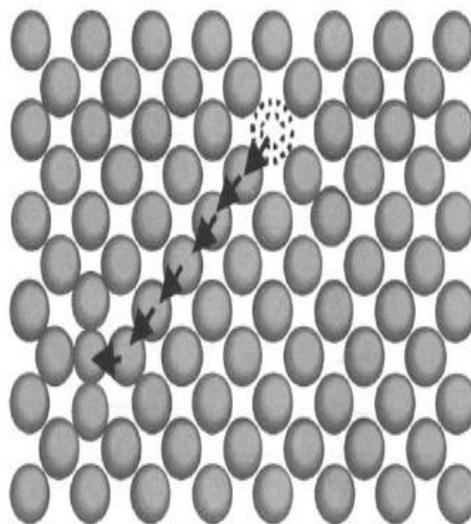
L'antiélectron va rapidement réagir avec un électron du matériau et donner naissance à un nouveau  $\gamma$  d'énergie bien plus faible.

Le bilan global de l'interaction des photons avec la matière est donc une ionisation : éjection d'un, éventuellement de plusieurs électrons d'une orbitale électronique d'un atome. Les électrons vont être émis avec un large spectre d'énergie cinétique [8].

### I-2-3-Le transfert d'énergie cinétique et de quantité de mouvement

Lorsque l'énergie transmise est supérieure à une énergie critique, dite énergie seuil de déplacement  $E_d$ , de l'ordre de 25 eV, l'atome cible peut quitter son site cristallin. On aura alors, à la place de l'atome choqué, une absence d'atome, c'est-à-dire une lacune.

L'atome qui a été éjecté de son site va choquer petit à petit sur son parcours divers atomes et finalement ne plus avoir assez d'énergie cinétique pour poursuivre son déplacement. Il s'insère au sein du réseau sous forme d'un atome interstitiel. On a alors créé une paire de Frenkel [17], constituée d'une lacune et d'un interstitiel (Figure I.2.1).



**Figure I.2.1** Formation d'une paire lacune-interstitiel Par déplacement focalisé d'un atome [4].

Si l'énergie transmise est très grande devant l'énergie seuil de déplacement, l'atome éjecté va prendre le nom d'atome primaire (pka, de l'anglais primaryknocked-on atom). Comme cet atome a une énergie importante, et qu'il est de masse équivalente aux atomes qui l'entourent, il va transférer par chocs successifs son énergie aux atomes adjacents.

En moyenne, à chaque choc, chaque atome transfère la moitié de son énergie. Il y a partage des énergies entre un atome cible et un atome incident. On réalise ainsi une cascade de déplacements.

On pourra tout d'abord remarquer que lorsqu'un neutron rapide a choqué un atome, il lui a transmis une énergie toujours faible devant son énergie initiale.

Le neutron incident repartira donc avec une énergie largement suffisante pour recommencer plus loin le processus de réalisation d'un primaire (pka).

Au cours de son histoire, chaque neutron induira des cascades séparées les unes des autres.

La fréquence avec laquelle de telles cascades apparaissent est directement liée à la section efficace de diffusion élastique des neutrons par les atomes cibles. Par contre, à l'intérieur des cascades, les fréquences de collision entre atomes incidents et atomes cibles dépendent de la section efficace d'interaction entre ces deux atomes, qui est bien plus grande [7].

Les cascades sont distantes les unes des autres mais la cascade elle-même est très compacte.

Une cascade déclenchée par un neutron rapide est induite par un ion d'énergie  $E_0$  de quelques dizaines, voire de quelques centaines de keV. L'ion incident choque un premier atome, un atome adjacent, et lui transmet en moyenne la moitié de son énergie (Figure I.2.2) Ils se répartissent donc entre eux l'énergie incidente  $E_0$  soit en moyenne  $(E_0/2)$ .

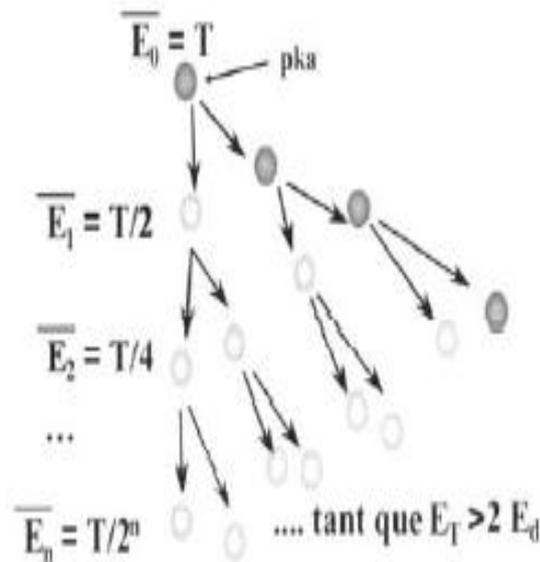
Le processus de la transmission d'énergie est répétitif tant que l'énergie transmise, ou l'énergie résiduelle d'un atome, est supérieure à l'énergie seuil de déplacement. Lorsque cette énergie est inférieure à l'énergie  $2 E_d$  les atomes peuvent encore se déplacer, mais ne peuvent plus mettre en mouvement de nouveaux atomes dans la cascade et la cascade devient figée.

On en déduit facilement le nombre d'atomes déplacés dans une cascade :

$$n = E_0 / (2 E_d)$$

En réalité, le nombre d'atomes déplacés est légèrement inférieur dans la mesure où, si un

ion particulier a une énergie légèrement supérieure à  $2 E_d$  le partage des énergies lors du choc suivant a peu des séries de chance de donner deux fois une énergie supérieure à  $E_d$  n'y aura plus qu'un atome déplaçable.



**Figure I.2.2.** Formation d'une cascade de déplacement à partir d'un primaire d'énergie initiale  $E_0$  [8].

Un facteur correctif, de l'ordre de 0.8, est donc rajouté pour cette évaluation du nombre d'atomes déplacés. Cette description d'une cascade est connue comme l'approche NRT (Norgett, Robinson, Torrens 1975) [9].

Les méthodes de modélisation par dynamique moléculaire, ont permis récemment de mieux comprendre la dynamique d'une telle cascade.

On s'aperçoit en particulier que si le nombre initial de défauts ponctuels, lacunes et interstitiels, est approximativement égal à ce qu'indiquait une telle approche, il apparaît très rapidement de nombreuses recombinaisons entre lacunes et interstitiels au sein même de la cascade.

Le nombre de défauts survivants, après quelques picosecondes, est très largement inférieur au nombre initial d'atomes déplacés.

Deux quantités permettent de caractériser ce qui se passe dans une cascade : le nombre d'atomes déplacés, généralement ramenés pour une irradiation de longue durée au nombre d'atomes totaux, exprimés en dpa (déplacement par atome) ou le nombre d'atomes qui ont été déplacés de leur site mais sont revenus sur un site du réseau cristallin (rpa, pour

remplacement par atome).

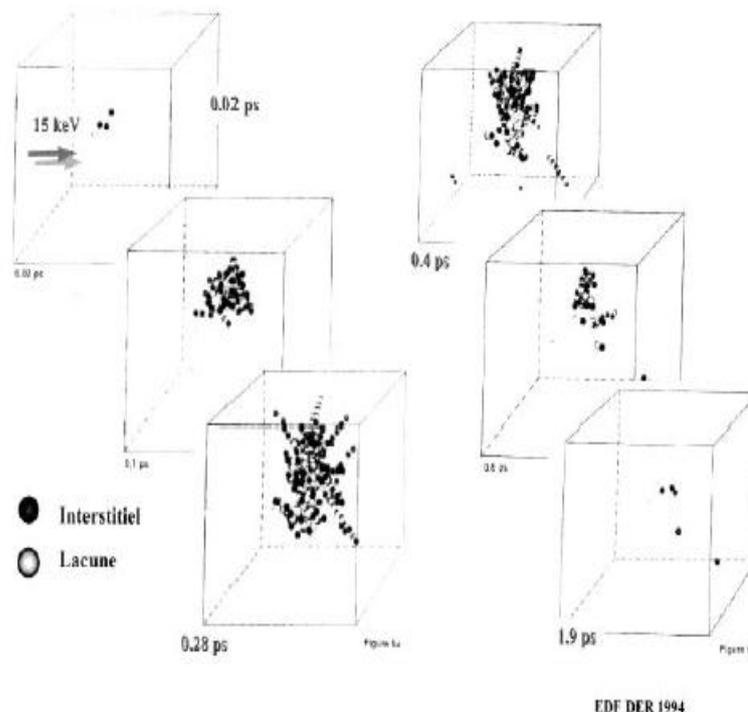
La Figure( I.2.3)donne une illustration de l'évolution au cours des premières picosecondes d'une cascade de déplacement dans un cristal de fer pour un ion incident de 15 keV. Le nombre d'atomes déplacés est de plusieurs centaines et le nombre d'interstitiels ou de lacunes survivantes est de l'ordre de la dizaine.

On remarque dans cette figure l'existence de séquences où des atomes se sont déplacés le long de lignes cristallographiques particulières. Il s'agit de séquences de focalisation.

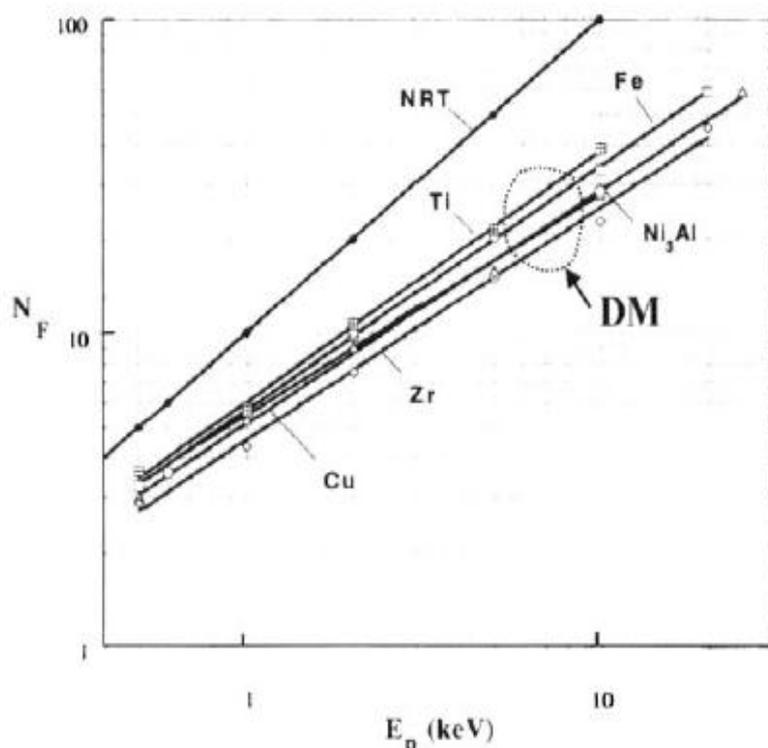
On peut en effet démontrer que, si des atomes sont légèrement séparés les uns des autres et si la première interaction a lieu approximativement dans la direction de l'alignement, une condition assez simple sur les écartements et le diamètre permet d'assurer que, de proche en proche, la direction de transmission des énergies et quantités de mouvements se rapproche de la direction de l'alignement.

Cependant tous les défauts créés ne contribuent par nécessairement au dommage à long terme ; en effet, même pendant la cascade, il ya recombinaison.

Ainsi, la Figure (I.2.4) permet de visualiser que le nombre de défauts ponctuels survivants obtenu par calcul en dynamique moléculaire est effectivement plus faible que le nombre déduit de l'approche NRT [8].



**Figure I.2.3**Évolution au cours des premières picosecondes d'une cascade de déplacement dans un cristal de fer pour un primaire d'énergie initiale  $E_0=15$  keV [9].



**Figure I.2.4.** Comparaison du nombre d'atomes déplacés calculés par dynamique moléculaire (DM) par évaluation de type NRT [9].

L'énergie seuil de déplacement des atomes dans le réseau cristallin dépend fortement de l'orientation. Ainsi pour le cuivre, suivant que l'on éjecte l'atome dans une direction de faible densité comme l'arête du cube ou dans une direction très dense comme la diagonale principale.

Lorsque l'énergie transmise à l'atome cible est relativement faible, inférieure à quelques dizaines d'électrons volts, l'atome cible est mis en mouvement mais reste dans son site cristallin, seule l'amplitude de sa vibration augmentant.

Par interactions successives sur les atomes environnants, il transmet son énergie cinétique en agitant les atomes adjacents. Cette augmentation locale de la vitesse des atomes correspond à une agitation thermique. Il s'agit donc d'un échauffement local [9].

#### I-2-4- le taux de création de défauts

Tous chocs des primaires induit une cascade, pour laquelle on déduira le nombre d'atomes déplacés  $n_p$  :

$$n_p = 0.8E_t / 2E_d$$

Ou :

Ed l'énergie de déplacement.

Et l'énergie moyenne transférée.

Pour l'énergie desquels on connaît la section efficace d'interaction élastique,  $\sigma_{dif}$ , tout en recherchant l'énergie moyenne du pka Et.

$$Et = 2E_n (m_c \cdot m_n) / (m_c + m_n)^2$$

Ou :

Et l'énergie moyenne du pka.

En l'énergie du neutron.

$m_n$  la masse du neutron.

$m_c$  la masse du cible.

Pour connaître le taux de création de défauts, on évaluera d'abord le taux de primaires  $G_p$ , induits par le flux de neutrons  $\Phi$ .

$$G_p = N \sigma(dif) \Phi = (\rho N / A) \sigma(dif) \Phi$$

Où :

$N$  est le nombre d'atomes par unité de volume.

$\rho$  La masse volumique.

$\mathcal{N}$  Le nombre d'Avogadro.

$A$  la masse atomique.

Le produit du nombre des primaires et du nombre d'atomes déplacés dans une cascade, normalisés au nombre total d'atomes dans le volume considéré, donne la valeur des dommages en dpa, selon l'approche NRT.

$$G_{DP} = G_p \cdot n_p / N$$

Ou :

$G_{Dp}$  le taux de défauts

$n_p$  le nombre d'atome déplacé

$N$  est le nombre d'atomes par unité de volume.

Pour plusieurs réacteurs les valeurs typiques sont les suivantes :

Énergie du neutron	Le flux ( $n.cm^{-2} s^{-1}$ )	Type de réacteur	Taux du dommage dans les cuves
1Mev	$5,0. 10^{13}$	REP	$1,5 dpa.an^{-1}$
1Mev	$5,0. 10^{13}$	RNR	$3 dpa.an^{-1}$
1Mev	$6.5. 10^{20}$	REP	$1 dpa.an^{-1}$
1Mev	$6,5. 10^{20}$	REB	$1,5 dpa.an^{-1}$

**Tableau(I.2.1)** le taux des dommages pour les cuves dans plusieurs types des réacteurs [9].

Pour chaque défaut ponctuel créé, le matériau stocke une énergie correspondant à la somme de l'énergie de l'interstitiel et de l'énergie de la lacune, soit quelques eV pour chaque paire de Frenkel.

Si rien ne se passe dans le matériau, l'énergie interne du matériau augmente avec le temps, au point de le rendre intrinsèquement instable.

Divers processus limitent la concentration en défauts ponctuels :

Au cours de l'irradiation, il peut y avoir recombinaison entre les défauts d'espèces opposées ou bien agrégation de défauts ponctuels d'une espèce donnée en défauts plus complexes.

L'évolution des défauts ponctuels au cours du temps, leur mode de disparition, objet de la section suivante, aura éventuellement un impact sur leur propriété.

### **-Conclusion**

Nous avons conclu de cette étude que l'augmentation du flux neutronique incident va augmenter le taux des dommages dans les matériaux métalliques.

### I-2-5-l'évolution des défauts ponctuels au cours du temps

#### I-2-5-1-les modes de recombinaison des défauts ponctuels

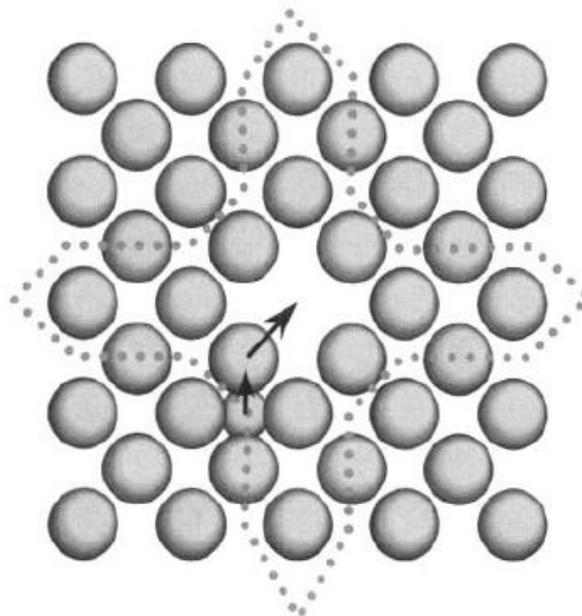
Si les lacunes et les interstitiels, se retrouvent au voisinage l'un de l'autre, on va avoir une disparition de l'interstitiel au dépend de la lacune c'est le phénomène de recombinaison [4].

Le volume dans lequel une telle recombinaison peut avoir lieu, appelé volume de recombinaison élastique, est de l'ordre de quelques centaines d'atomes. Cette recombinaison élastique ne fait pas intervenir de diffusion.

Elle est athermique et a lieu en quelques vibrations de réseau. Dans le cas d'un composé défini, cette recombinaison peut être à l'origine d'un désordre chimique.

Dans le cas général, les défauts ponctuels vont se recombinaison en se déplaçant sur des grandes distances. Il y aura recombinaison après diffusion.

La diffusion des interstitiels étant très rapide devant celle des lacunes, ce sont essentiellement les interstitiels qui vont rencontrer les lacunes.



**Figure I.2.5** Recombinaison élastique d'une paire de Frenkel à l'intérieur du volume de recombinaison [6].

#### I-2-5-2-La disparition des défauts ponctuels sur les puits

Les défauts ponctuels peuvent rencontrer des défauts cristallins sur lesquels ils vont disparaître. C'est en particulier le cas sur les dislocations, les interfaces, les joints de grains ou les surfaces de cavités [7].

Dans le cas des dislocations, l'arrivée d'un interstitiel au voisinage d'une dislocation se

traduit par une interaction dépendante de la position relative de l'interstitiel et de la dislocation.

Cette interaction est toujours attractive dans une région particulière de l'espace. La lacune ou l'interstitiel disparaîtront sur la ligne de dislocation. Le déplacement correspondant de la dislocation est appelé montée.

La montée est obtenue par avancé horizontale, le long de la ligne de dislocation, de décrochements d'un niveau atomique, où viennent se placer les interstitiels, induisant un mouvement vertical. De la même manière, les interfaces, joints de grains, surfaces libres ou surfaces de cavités sont des sites sur lesquels les défauts ponctuels peuvent disparaître.

### I-2-5-3-L'agrégation des défauts ponctuels

Les défauts ponctuels peuvent s'agréger entre eux. Deux lacunes se rencontrant formeront une bilacune, défaut moins énergétique que la somme des deux lacunes, mais moins mobile. De proche en proche, des lacunes vont pouvoir s'agglomérer [8].

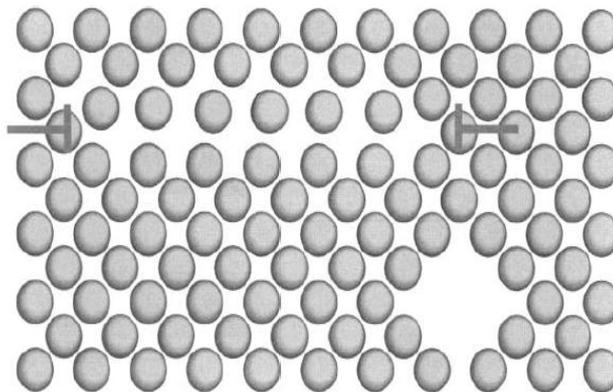
Au cours de ce processus d'agglomération, deux configurations sont envisageables :

Une configuration tridimensionnelle donnant naissance à une cavité ou une configuration plane sous forme d'un disque.

Le bilan énergétique de la formation de ces deux défauts permet de montrer que la formation de disques de lacunes, c'est-à-dire une boucle de dislocation lacunaire, est énergétiquement plus favorable que la formation de cavités.

Ces dernières ne s'amorcent qu'en cas de formation in situ de gaz, généralement de l'hélium par réaction  $(n,\alpha)$ . En ce qui concerne les interstices et leur agglomération ne peut avoir lieu que sous forme de disques d'interstitiels. On obtiendra alors des boucles de dislocation interstitielles.

On a pu montrer récemment que ce type de défaut se forme à l'intérieur des cascades au tout début des effets d'irradiation.



**Figure I.2.6.** Montée d'une dislocation par condensation d'interstitiels sur la ligne [9].

**I-2-6-conclusion**

Nous avons donnée dans cette deuxième partie les interactions particules-matière en insistant sur les effets des électrons, neutrons et ions sur les métaux et les alliages, et le transfert d'énergie cinétique et de quantité de mouvement entre les particules et les atomes cibles, et le taux de création de défauts ponctuels.

Nous avons aussi considéré l'évolution de ces défauts au cours du temps et les effets correspondants.

# **Chapitre I : Revue bibliographique**

**3<sup>ème</sup> partie**

**Dommmages d'irradiation et  
microstructure**

### **I-3-1-introduction**

En présence des flux de particules, les matériaux subissent des transformations variées (ionisation, transmutation, déplacements d'atomes, fission...), dont les conséquences sont une modification sensible de la microstructure et donc des propriétés d'emploi. Les modes de création de ces défauts et leurs mécanismes d'évolution dépendent fortement du type de matériau (céramique, polymère, métal...).

Dans cette partie, on examinera comment les défauts ponctuels et leurs évolutions ont un impact sur la microstructure des alliages métalliques et leurs propriétés, que ce soit le comportement mécanique ou des évolutions géométriques. Ces phénomènes seront examinés de façon générique [10].

### **I-3-2-L'évolution des défauts ponctuels**

La diffusion et tous les mécanismes que la diffusion contrôle sont fortement dépendants de la concentration en lacunes. Ainsi l'irradiation induira une accélération de tous les phénomènes impliquant une diffusion (homogénéisation, précipitation...).

L'évolution de la concentration des lacunes induira des impacts considérables sur les propriétés des solides sous irradiation, par l'influence des plusieurs effets. Le premier est une augmentation des phénomènes de transports atomiques.

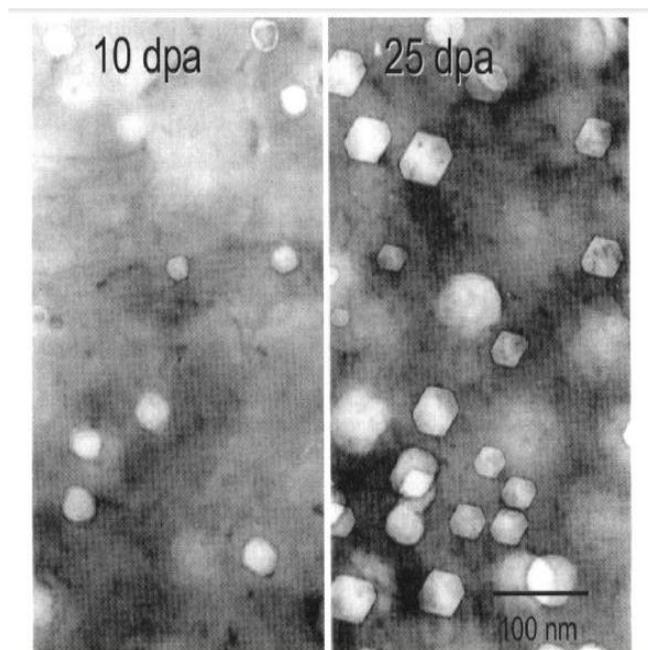
### **I-3-3-Formation de cavités et gonflement**

Aux températures intermédiaires, de l'ordre de 400 à 500 °C pour les aciers inoxydables, on observe un phénomène de regroupement des lacunes sous forme de cavités.

La formation de ces cavités est assistée par la création d'hélium au sein du matériau. Celui-ci provient des réactions de type  $(n, \alpha)$  [11].

Ces cavités, de quelques fractions de micromètres de diamètre, sont régulièrement réparties dans le matériau. Leur présence se traduit par une diminution continue de la densité du métal (gonflement) et donc par une modification de la géométrie globale de la pièce qui en est constituée.

Le gonflement est un phénomène limitant des réacteurs à neutrons rapides, dans la mesure où les déformations peuvent atteindre plus de 10 % [11].



**Figure I.3.1** Observation de cavités au cours de l'irradiation d'un acier 316 irradié aux électrons de 1 MeV [9].

#### I-3-4-Les boucles de dislocations

Les interstitiels et les lacunes sont mobiles dans les réacteurs nucléaire et sous irradiations réalisées dans les conditions de température classique. Ces défauts ponctuels peuvent se rencontrer et, s'ils sont de natures opposées, s'annihiler. S'ils sont de même nature, ils vont former des agrégats tels que les bilacunes, trilacunes et les agrégats équivalents pour les interstitiels [12].

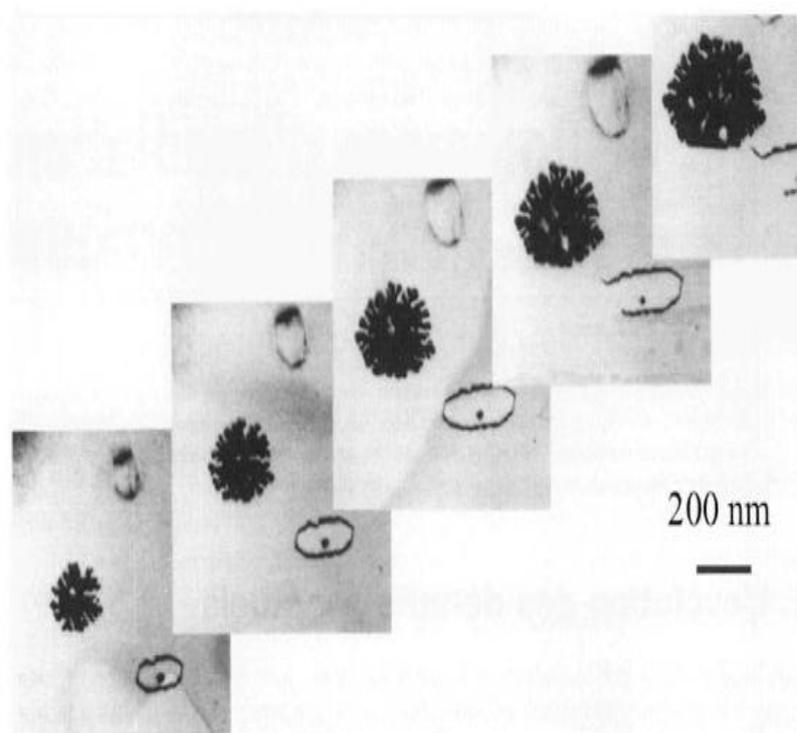
Pour les irradiations réalisées dans les conditions de température classique des réacteurs ces agrégats grossissent et forment des boucles de dislocations lacunaires ou interstitielles. Ces boucles sont relativement petites et leur densité est assez élevée (diamètre moyen de l'ordre de 10 nm, pour une densité de  $10^{21}$  à  $10^{23}$  at.  $m^{-3}$ ) [12].

Par ailleurs les lacunes et interstitiels peuvent migrer, rencontrer les dislocations et y disparaître, ce qui induit une montée des dislocations et donc, comme tout déplacement de dislocations, une déformation de la structure.

Comme les dislocations forment un réseau et sont donc ancrées sous forme des segments, ces segments voient leur longueur augmenter. Au cours de l'irradiation, la densité de dislocations augmente, jusqu'à ce que leur densité soit telle que la résolution micrographique du réseau de dislocations devienne pratiquement impossible.

Certaines observations récentes rapportent une disparition du réseau de dislocations à très forte fluence.

Que ce soit par la formation de boucles, ou par la montée de dislocations, le déplacement des dislocations associé à ces condensations de défauts ponctuels se traduit localement par des modifications géométriques.



**Figure I.3.2** Observation in situ de la croissance de boucles de dislocation par condensation de défauts ponctuels, lors d'une irradiation aux électrons de 1 MeV [13].

### I-3-5-Les déformations induites par les boucles

Du point de vue macroscopique, si l'orientation des boucles ou l'orientation du mouvement de montée des dislocations est aléatoire, on obtiendra en moyenne une déformation nulle. Par contre, s'il existe une raison conduisant à une précipitation des boucles ou une montée des dislocations anisotrope, on obtiendra une déformation macroscopique. Deux causes principales peuvent induire une telle anisotropie [14].

La première cause d'anisotropie peut être liée au matériau, lui-même anisotrope. C'est le cas du zirconium ou d'autres métaux à faible symétrie cristalline.

Lors des déformations de fabrication et des traitements thermomécaniques, les cristaux

élémentaires, c'est-à-dire les grains, s'orientent préférentiellement selon certaines directions de l'espace.

On développe dans le matériau une texture cristallographique. À cette texture, pour des cristaux anisotropes, est associée une anisotropie de propriétés. Cette anisotropie induite par la texture induit une anisotropie de condensation et donc de déformation.

Le phénomène résultant est une déformation macroscopique de l'élément considéré, par exemple un allongement dans un axe particulier, en l'absence de toute sollicitation appliquée. Ce phénomène a le nom de croissance.

La deuxième source d'anisotropie peut être induite par les sollicitations mécaniques. Ainsi sous un effort de traction, les boucles interstitielles vont nucléer dans un plan perpendiculaire à la direction principale de traction. Les boucles lacunaires germeront dans une direction parallèle à l'axe de traction [15].

De même, l'interaction des défauts ponctuels avec les dislocations dépendra de leur orientation relative par rapport aux contraintes appliquées.

Les condensations de défauts ponctuels sur les dislocations seront donc favorisées pour des orientations qui feront travailler les sollicitations mécaniques. On aura ainsi une déformation continue sous irradiation dans le sens de la contrainte appliquée. C'est le mécanisme de fluage d'irradiation, dont la contribution à basse température peut être largement supérieure à celle du fluage thermique.

Le fluage d'irradiation se caractérise par une vitesse de déformation approximativement linéaire avec la contrainte appliquée.

### **I-3-6-Les transports atomiques accélérés par l'irradiation**

Parmi les phénomènes de transport modifiés par l'irradiation, un cas important est relatif à une augmentation de la cinétique de retour vers les conditions d'équilibre des alliages métalliques.

Des alliages sursaturés, métastables dans les conditions normales d'emploi, peuvent voir leurs structures évoluer au cours de l'irradiation, pour retourner vers les structures plus proches de l'équilibre thermo-chimique.

Cette précipitation accélérée par l'irradiation relève des phénomènes inattendus en métallurgie et prévisibles à l'aide des diagrammes de phases, mais qui n'étaient pas observable à ces températures pour des raisons cinétiques.

À titre d'exemple, le cuivre est pratiquement insoluble dans le fer. Après une

homogénéisation à haute température (600 à 700 °C) et refroidissement brutal, le cuivre est en solution sursaturée dans la ferrite. Il ne pourrait précipiter que lors d'un traitement à haute température (> à 500 °C). Cependant, sous irradiation, cette précipitation peut avoir lieu dès 300 °C. Cette précipitation est partiellement responsable de la fragilisation des aciers de cuve.

Il en est de même, pour les alliages zirconium-niobium utilisés dans les cœurs de réacteurs à eau. Le niobium est un élément d'addition du zirconium à faible concentration (1 à 3 %). Il est soluble vers 600 °C à ces concentrations, mais reste très peu soluble à basse température.

Lors de la fabrication, le niobium est mis en solution dans le zirconium mais ne peut pas précipiter de façon significative lors des traitements thermiques ultérieurs. Cependant, lors d'une irradiation, le niobium en sursaturation pourra précipiter aux températures d'irradiation sous forme de toutes petites particules riches en niobium [16].

Ce phénomène apparaît dans les alliages zirconium-niobium utilisés pour les tubes de force des réacteurs CANDU, et les gainages Zr 1 % Nb.

Le retour vers un état métallurgique plus proche de l'équilibre thermodynamique se traduit d'ailleurs par une amélioration de la résistance à la corrosion de ces alliages après irradiation.

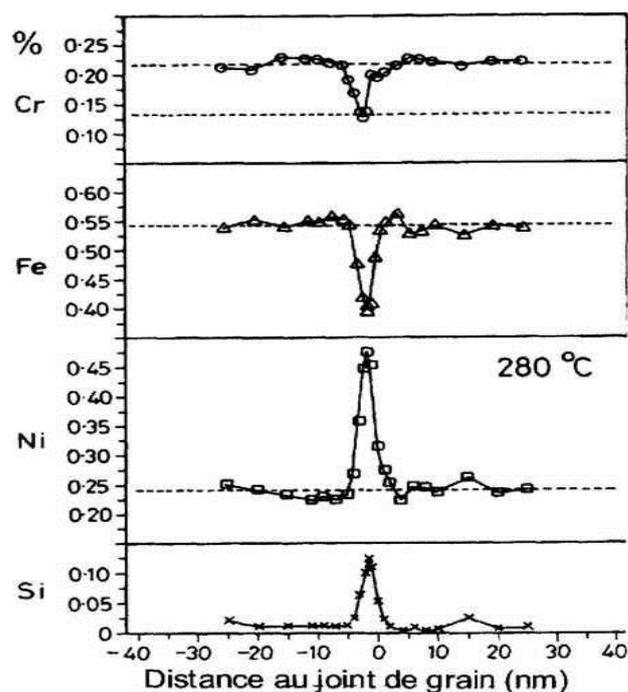
Un autre phénomène important lié aux diffusions des défauts ponctuels est le phénomène de ségrégation induite par l'irradiation.

Les défauts ponctuels créés par l'irradiation sont mobiles et diffusent dans les grains pour disparaître sur tous les puits. Parmi ceux-ci, il y a lieu de considérer les joints de grains qui sont des puits relativement efficaces.

Lors de la diffusion de ces défauts ponctuels, l'interaction entre les défauts ponctuels et certains éléments d'alliage ou certaines impuretés mineures peut induire un couplage de diffusion. Ceci va conduire à l'observation d'une ségrégation de ces éléments vers le lieu où les défauts ponctuels disparaîtront : ainsi un petit atome s'associera avec un interstitiel, qui l'entraîne vers le joint.

On peut ainsi obtenir un enrichissement significatif, ou un appauvrissement, d'un élément donné ou de plusieurs éléments au niveau des joints de grains.

Ce phénomène d'enrichissement ou appauvrissement sera repris ultérieurement pour les phénomènes de fissuration intergranulaire des aciers inoxydables.



**Figure I.3.3** Ségrégation intergranulaire dans un acier inoxydable [9].

### I-3-7- Les déplacements des équilibres thermodynamiques

Dans des conditions où normalement on aurait précipitation ou mise en solution d'un élément particulier, on peut observer sous irradiation un déplacement significatif des températures et composition correspondant à l'équilibre des phases[17].

On obtient ainsi un nouveau diagramme de phases sous irradiation, il faut cependant être attentif au fait que la notion de diagramme de phases et d'équilibre thermodynamique n'est pas applicable aux conditions d'irradiation.

En effet, les chocs induits aux atomes et les sauts d'énergie imposés localement par transfert d'énergie entre atomes et neutrons ou entre ions sont très largement supérieurs aux variations d'énergie induites par l'agitation thermique.

L'exploration du minimum d'énergie du système, par les théories de la thermodynamique statistique, visant à préciser les phases à l'équilibre thermodynamique, n'est donc pas adaptée aux situations sous irradiation.

Sous flux d'irradiation neutronique par exemple, on peut donc voir apparaître de nouvelles phases ou disparaître des phases connues, car le système optera pour un nouvel état de pseudo-équilibre dynamique.

### I-3-8-Les désordres induits par l'irradiation

Dans le cas des alliages dilués, comme les aciers, le remplacement d'un atome de fer par un autre atome de fer ou, dans les aciers inoxydables, d'un atome de fer par un atome de chrome ou de nickel, n'a pas d'effet spécifique.

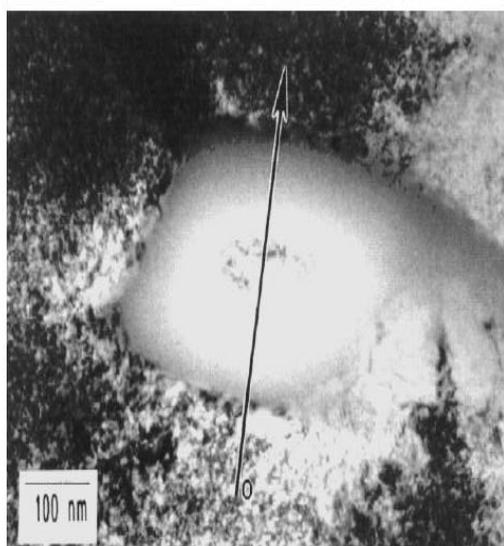
Le dommage d'irradiation, lors des recombinaisons entre lacunes et interstitiels, ne laissera pas de dommage après cette annihilation.

Par contre dans le cas des composés poly-atomiques, du genre  $AB_2$  ou  $AB$ , le remplacement d'un atome A par un atome B aura lieu lorsqu'un interstitiel d'un type donné se trouvera à proximité immédiate d'une lacune de l'autre espèce. En effet la somme des énergies de l'interstitiel et de la lacune est plus importante que l'énergie de l'atome positionné dans le site d'une autre espèce chimique, appelé anti site.

Par ce mécanisme, l'alliage ordonné va peu à peu subir un dommage de désordre, où l'ordre à grande distance entre les atomes de type A et B se trouve détruit et où l'on obtient une organisation aléatoire, sur les sites cristallins, des atomes A et B. Ce désordre chimique peut modifier les propriétés de cohésion du matériau et conduire soit à des transformations de phases, soit à une éventuelle amorphisation [17].

À titre d'exemple, la Figure I.3.4 montre un composé intermétallique Zr (Fe, Cr)<sub>2</sub> qui devient peu à peu amorphe, en partant de l'interface précipité matrice.

Ce phénomène est en partie responsable de la dégradation de la résistance à la corrosion de ces alliages après irradiation.



**Figure I.3.4 :** Transformation amorphe d'un intermétallique Zr (Fe, Cr)<sub>2</sub> sous irradiation [9].

Dans le cas des cristaux ioniques, le remplacement d'un atome par un autre est souvent difficile en raison des interactions coulombiennes et des fortes valeurs que pourrait prendre l'énergie d'un anion dans un site cationique [17].

### **Conclusion**

L'irradiation peut provoquer une dégradation des propriétés du matériau en modifiant sa microstructure comme les gonflements, l'amorphissement, et appauvrissement ou l'enrichissement d'un élément d'adition, ou apparitions des cavités au cour de cette irradiation.

## **CHAPITRE II**

**Applications aux alliages et  
composants des réacteurs.**

## II-1-introduction

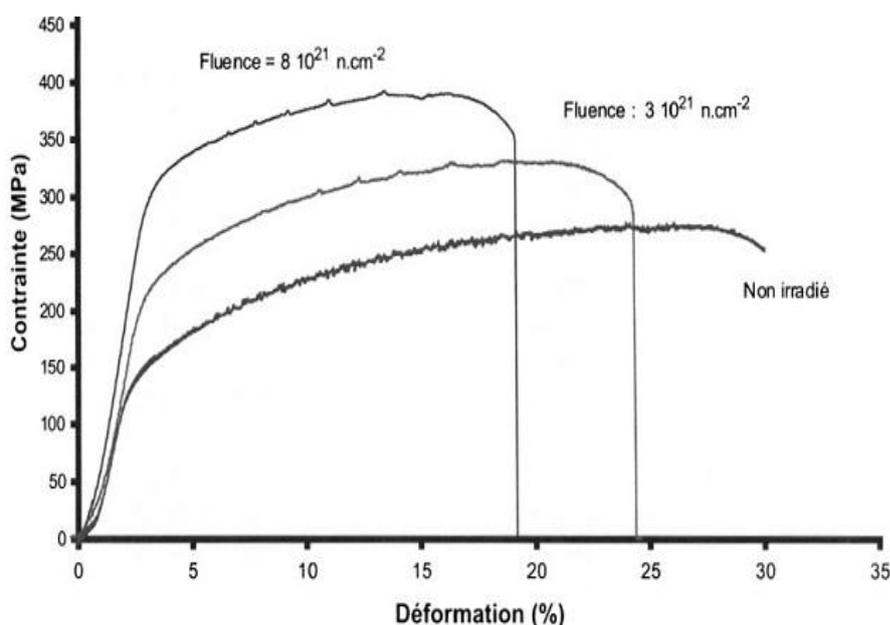
De nombreux composants des réacteurs et des composants de structure, des composants à fonctionnalités neutroniques ou d'autres éléments qui tous subissent à un titre ou à un autre des effets d'irradiation.

À l'occasion de l'examen de chacun de ces éléments, on détaillera de façon plus approfondie des mécanismes spécifiques d'effets d'irradiation. Ceci permettra de mettre en relief les mécanismes et les limitations induites par l'irradiation [18].

## II -2-application sur Les alliages des constructions a base d'aluminium

On utilise fréquemment les alliages d'aluminium et en particulier l'alliage AG<sub>3</sub> (Al 3 % Mg) pour les éléments de structures des réacteurs d'essai. Cet alliage représente un matériau qui a des propriétés mécaniques acceptables en raison d'un durcissement par solution solide lié à la présence des atomes de magnésium. et aussi il résiste à la corrosion à l'eau tiède.

La diffusion à l'ambiante des atomes de magnésium conduit, lors d'un essai mécanique, à l'apparition d'une vibration de la machine d'essai en raison de décrochements successifs des atomes de magnésium des cœurs de dislocations où ils sont piégés (Figure II-1).



**Figure II-1** : Évolution des propriétés mécaniques de l'AG<sub>3</sub> induite par l'irradiation [18].

Au cours de l'irradiation, compte tenu des fluences très importantes reçues, qui peuvent

dépasser  $10^{22}$  n cm<sup>-2</sup>, une réaction de capture sur l'aluminium conduit à la formation de silicium in situ en quantité pondérale, selon la réaction :



Pour une fluence de  $10^{22}$  n cm<sup>-2</sup>, on obtient environ 0,4 % Si par transmutation. Ce silicium créé par transmutation interagit avec le magnésium en solution solide et donne naissance à une précipitation de Mg<sub>2</sub>Si. Ces précipités sont immobiles et, lors d'un essai mécanique, on observe un effet de disparition du phénomène de vibration, puisque les dislocations interagissent maintenant principalement avec les particules de Mg<sub>2</sub>Si, et une augmentation de la limite d'élasticité en raison de la présence de ces particules qui bloquent les dislocations [19].

### Conclusion

Nous avons conclu de cette application que la limite d'élasticité augmente avec l'augmentation de flux appliqué et qui suit aussi la croissance du durcissement de ces types d'alliages.

### II-3-application sur les alliages de cuivre

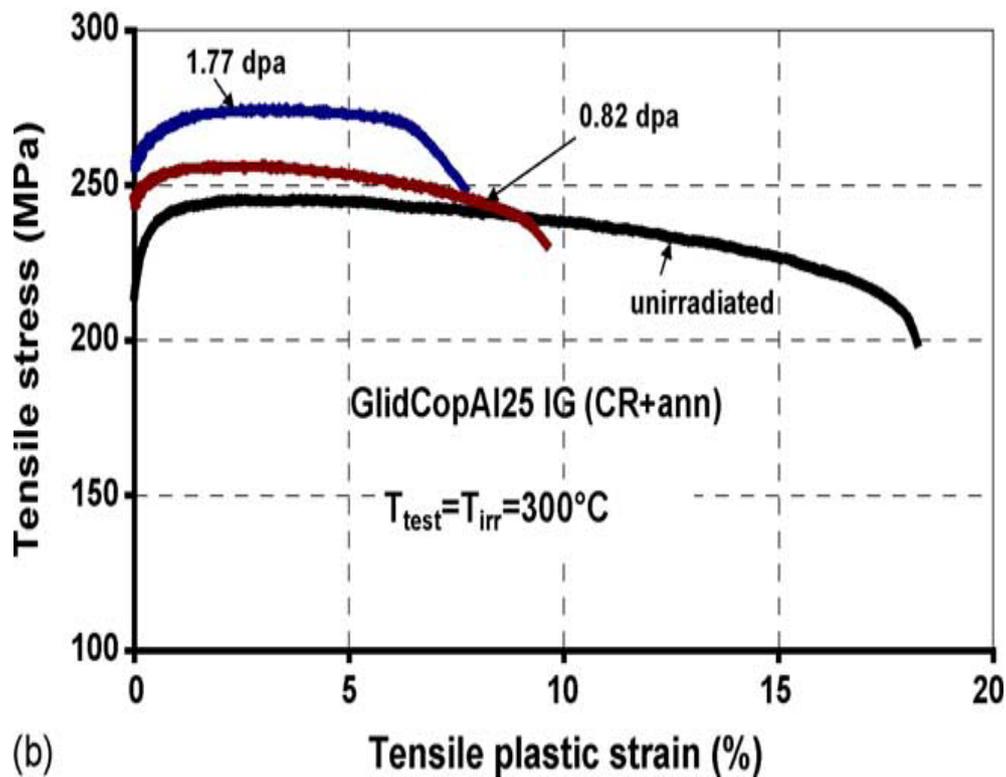
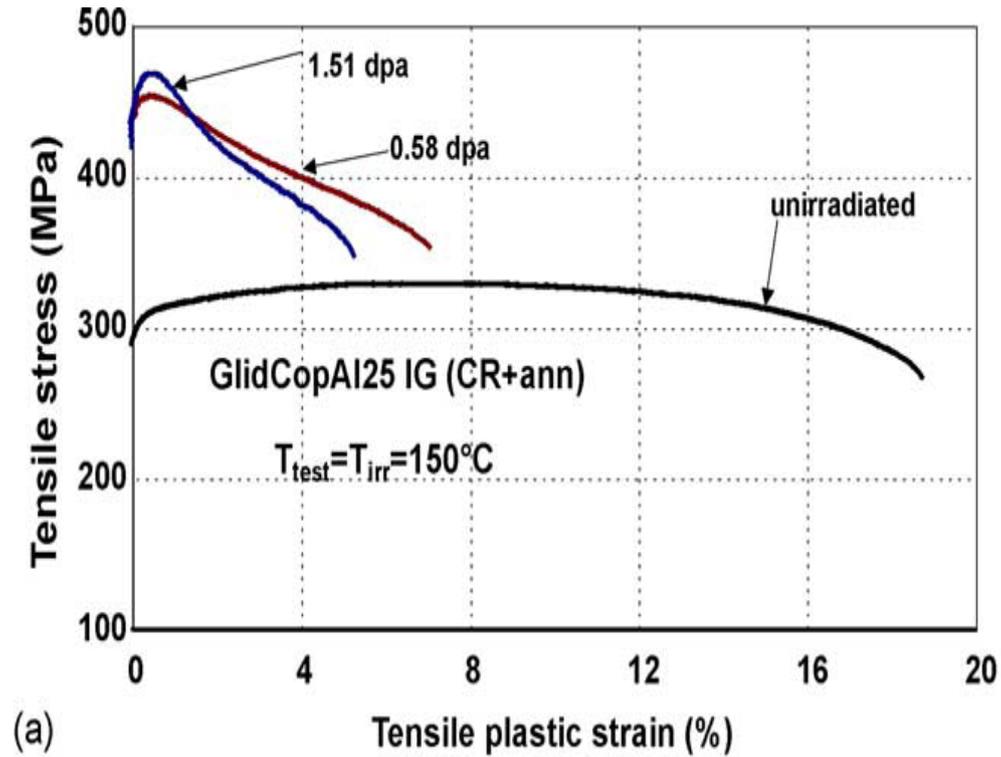
Les alliages de cuivre subissent de grandes variations pendant l'irradiation surtout sur les propriétés mécaniques par une dégradation de la résistance mécanique comme l'alliage de CuCrZr [18].

En 1995 deux alliages de cuivre en précipité ont des amas par des fortes doses d'irradiation et se sont conduits à un accroissement de l'énergie de rupture et avec un taux de dommage de l'ordre de 3dpa et dans une température de 150-300 °C.

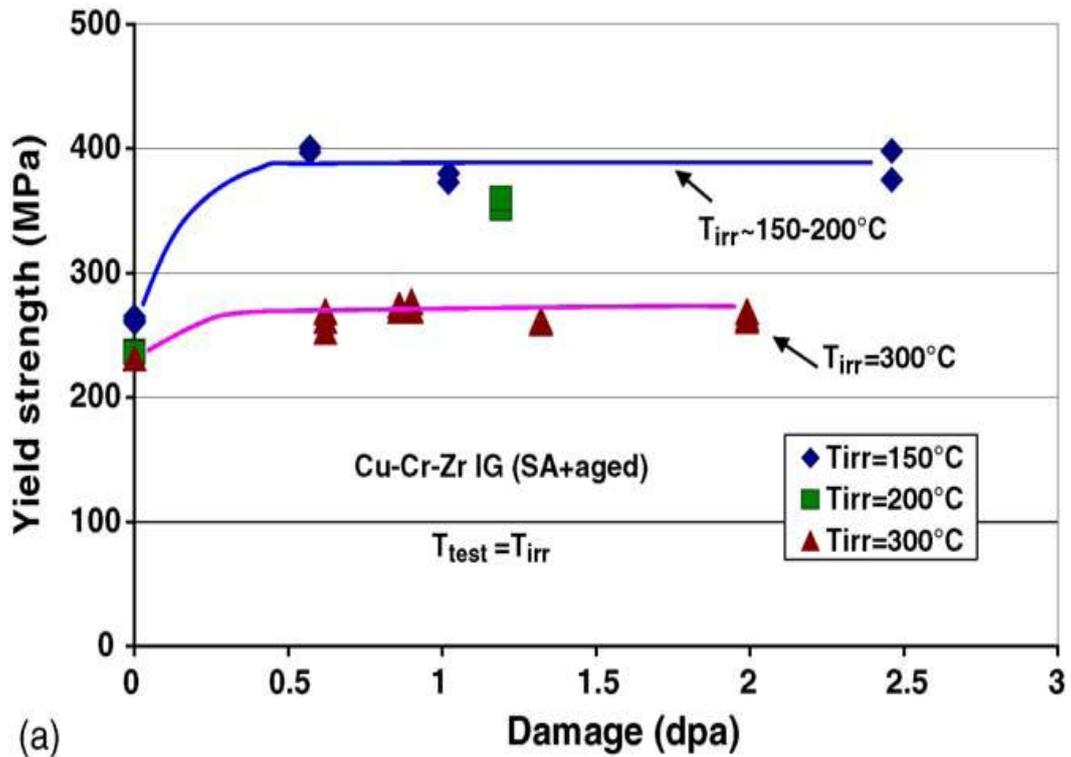
L'irradiation par les neutrons rapides à la température de 150°C sur ce type d'alliage donne naissance à des contraintes qui croissent avec la dose déposée.

L'effet des neutrons rapides sur les alliages de cuivre à la température 150 °C et 300 °C

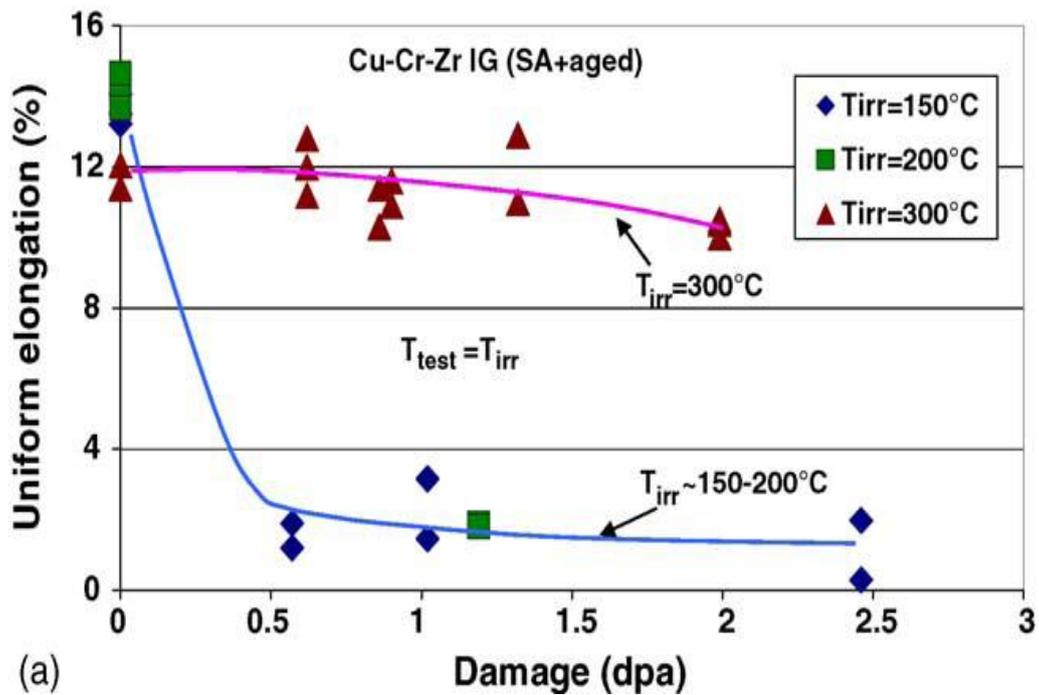
Pour des doses différentes d'irradiation dans les figures suivantes qui présentent les variations des contraintes appliquées sur l'alliage en fonction du taux de la limite d'élasticité (figure II-2) et l'effet des dommages d'irradiation sur l'élasticité et la tendance vers la ductilité (figure II-3)



**Figure II 2 :** les variations des contraintes appliquées sur l'alliage en fonction de la tension d'élasticité [19].



(a)



(a)

**Figure II-3 :** l'effet des dommages d'irradiation sur l'élasticité et la tendance vers la ductilité [19].

### Conclusion

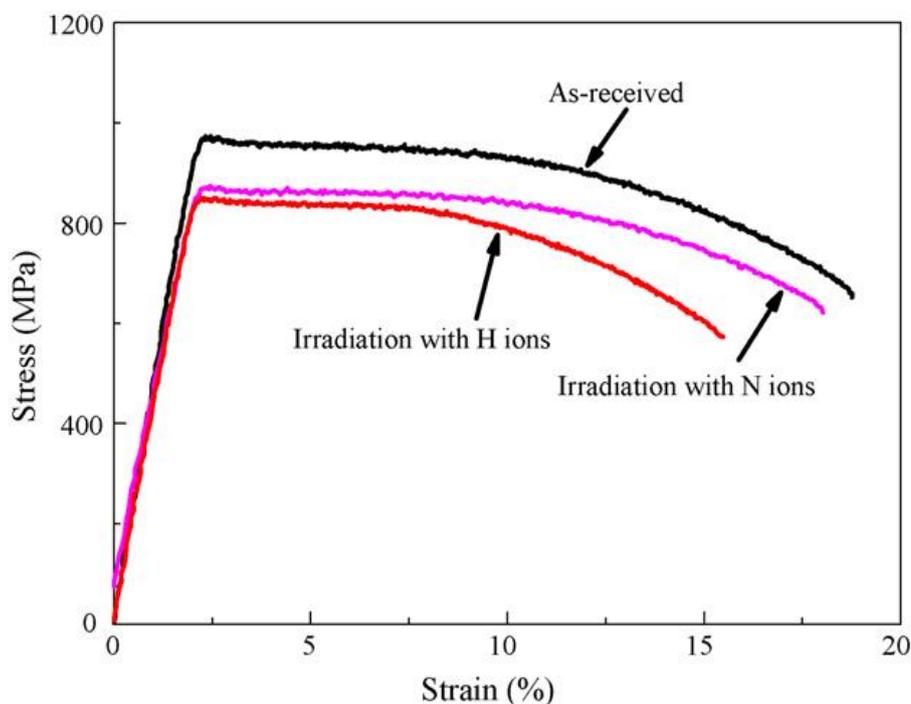
Nous avons conclu de cette application que la tendance à l'élasticité des alliages de cuivre est très grande pour les alliages non irradiés et cette tendance augmente avec la température.

Nous avons conclu aussi que les taux de dommages augmentent avec les contraintes appliquées, et la ductilité diminue avec la décroissance de la température et inversement proportionnel avec le taux de dommages.

### II- 4- l'effet d'irradiation ionique sur les propriétés mécaniques d'alliage de Ti-6Al-4V

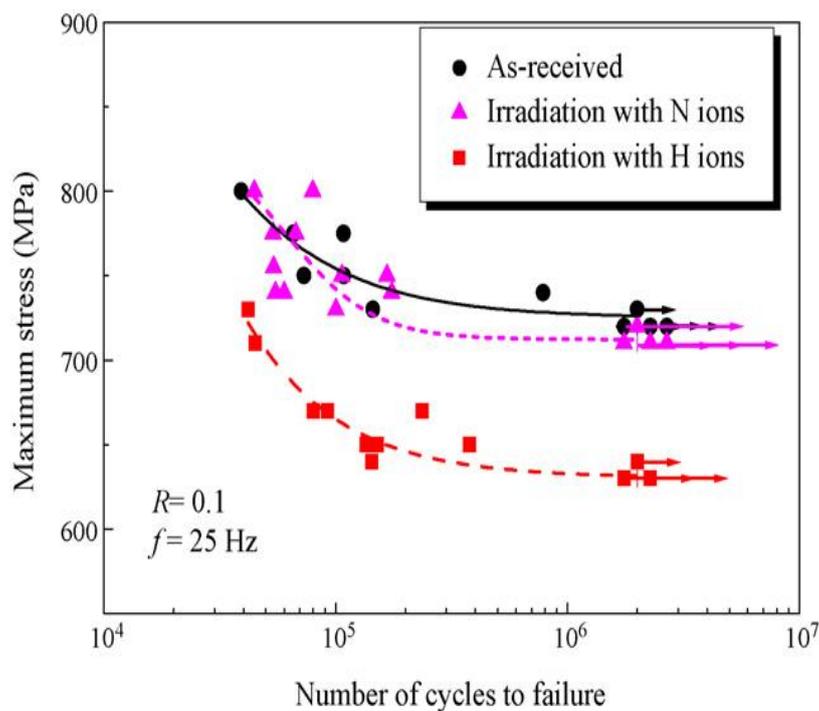
Ti-6Al-4V est l'alliage le plus utilisé parmi les alliages de titane par ses propriétés spécifiques et par aussi sa densité minimale et sa dureté, ce matériau a de grandes applications dans les sciences de l'aérospatial, dans l'espace l'irradiation ionique est très forte par l'influence du soleil qui est une source d'un flux d'électrons et de protons, les ions qui entourent la terre sont les ions d'hydrogène et les ions de nitrogène qui influent directement sur les fusées spatiales. On va étudier les propriétés mécaniques et l'effet de la fatigue sur ce type d'alliage irradié par les ions d'hydrogène et les ions de nitrogène [19].

La première application est l'effet d'irradiation de l'alliage Ti-6Al-4V par les ions de nitrogène et d'hydrogène et leur influence sur les courbes des contraintes appliquées comme la figure (II-4).



**Figure II-4-** l'évaluation des contraintes appliquées sur l'alliage Ti-6Al-4V avant et après l'irradiation [19].

La deuxième application c'est l'effet d'irradiations ioniques de l'alliage Ti-6Al-4V sur le comportement de la fatigue avec les ions d'hydrogènes et de nitrogènes comme la figure (II-5)



**Figure II-5** l'effet d'irradiations ioniques de l'alliage Ti-6Al-4V sur le comportement de la fatigue [20].

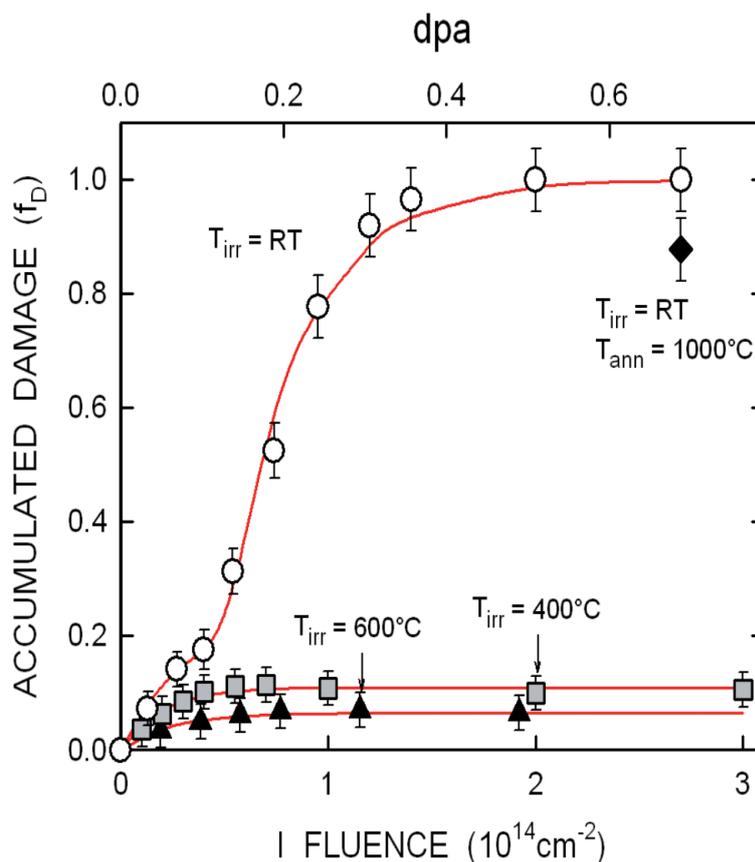
### Conclusion

Nous avons conclu de cette application que la ductilité diminue avec l'irradiation et la déformation plastique augmente linéairement avec les contraintes appliquées. Et l'effet de l'ion H est plus grand que l'ion N.

### II-5- Effets d'irradiation dans les carbures Pour les réacteurs du futur

Des nouvelles études en Science des Matériaux est faite pour amélioré le rendement des centre nucléaires qui se base sur quatre grandes catégories : les aciers de structure, les céramiques combustibles, les matrices ou revêtement du combustible et le graphite. Par exemple, dans les futurs réacteurs à haute température, le combustible envisagé (oxyde d'uranium, de thorium ou de plutonium) serait conditionné sous forme de sphères enrobées de couches de carbure de silicium SiC.

Notre application consiste à étudier, les modifications structurales induites par irradiation avec des ions d'iode I a basse et de grande énergie, à différentes températures. Et l'amorphisme induit par cette irradiation, comme il montre la figure suivante.



**Figure II-6 :** Cinétiques d'endommagement pour un monocristal de SiC irradié avec des ions I de 700 keV à différentes températures [20].

### Conclusion

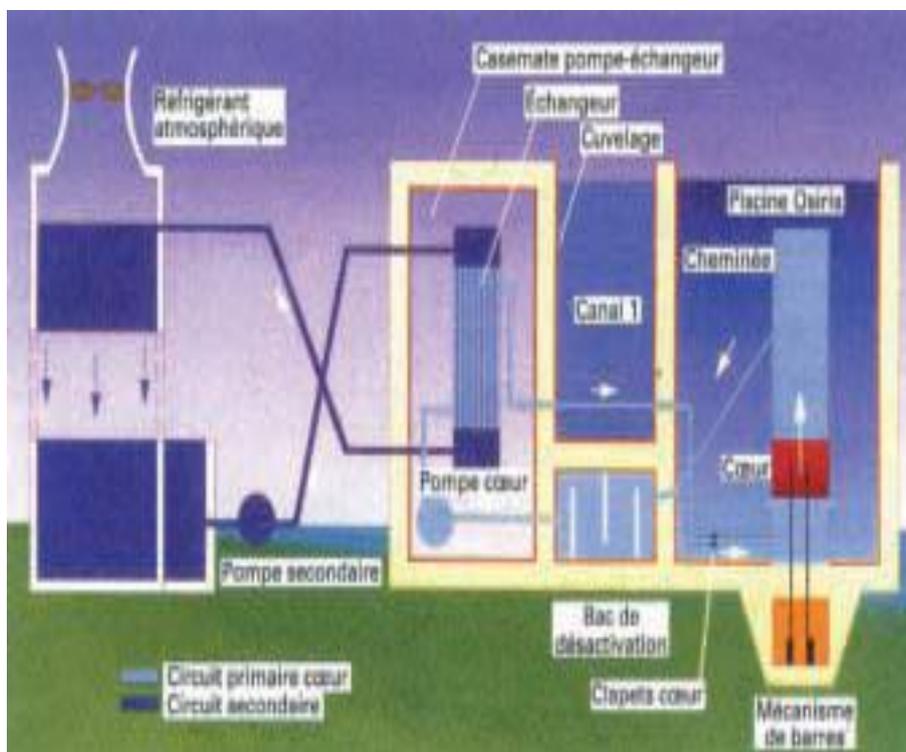
Nous avons conclu que l'irradiation à 1000 °C conduit à la formation d'une couche amorphe pour des doses supérieures à 0.2 dpa, alors que l'irradiation à 400 °C ou 600 °C produit seulement un faible endommagement. Ce résultat, indique que SiC est un matériau facilement amorphisable par collisions nucléaires.

## II-6-application sur les cuves des réacteurs à eau pressurisée (REP)

### II-6-1 description des cuves nucléaires

La cuve c'est l'élément principal du centre nucléaire (figure II-7), il est réalisée en acier ferritique et est recouverte d'un placage en acier inoxydable sur sa face interne. C'est une

barrière qui, par sa taille, et sa structure, constitue un composant majeur pour la sûreté. Donc les cuves se sont des éléments très important dans les réacteurs à eau pressurisée.



**Figure II-7** : représentation d'une coupe du centre nucléaire de type REP [21].

Les géométries de cette cuve en font un appareil tout à fait exceptionnel : diamètre de l'ordre de 4 mètres, hauteur d'une douzaine de mètres, pour une épaisseur de 20 à 24 cm, soit une masse totale de 350 à 450 tonnes, couvercle compris.

Ces dimensions, dont l'origine est liée à la pression interne du calo- porteur (155 bars), en font un produit impressionnant. En France, la cuve est fabriquée en acier 16 MnNiMo 05 (anciennement dénommé 16 MND 5), équivalent à l'acier américain A508 Cl.3. L'acier 16 MnNiMo 05 a pour composition (en masse %) :

$C_{\max}$	Mn	Ni	Mo	$Cr_{\max}$	Si
0,2	1,15/1,55	0,5/0,8	0,45/0,55	0,25	0,1/0,34

**Tableau II-1** : la composition de l'acier de cuve nucléaire en France [22].

On remarque que le durcissement est assuré par les éléments d'alliage essentiellement le manganèse, le nickel et le molybdène, et un faible taux de carbone facilitant la soudure des viroles.

Les contraintes appliquées sur la cuve par la pression de l'eau primaire sont de l'ordre du tiers de la limite d'élasticité de cet acier.

Caractéristiques	a l'ambiante	à 350 c <sup>0</sup>
Limite d'élasticité R <sub>E</sub> (MPa)	480	420
Charge à la rupture R <sub>E</sub> (MPa)	610	570
Allongement a rupture	25	22
Energie Charpy (da) cm <sup>-2</sup>		a -20c <sup>0</sup> :18-20 a 0c <sup>0</sup> :20-24

**Tableau II .2.** Caractéristiques mécaniques de l'acier de cuve [23].

Les éléments de soufre, phosphore et cuivre sont d'ailleurs minimisés pour réduire les effets de fragilisation par l'irradiation et ils sont généralement sensiblement inférieurs aux maxima indiqués.

Quant au cobalt, il est également minimisé pour réduire l'irradiation  $\gamma$  lors des interventions, en raison de son activation en <sup>60</sup>Co et de sa décroissance libérant des photons  $\gamma$  de 1,6 MeV.

#### II-4-2-L'effet de fragilisation sous irradiation

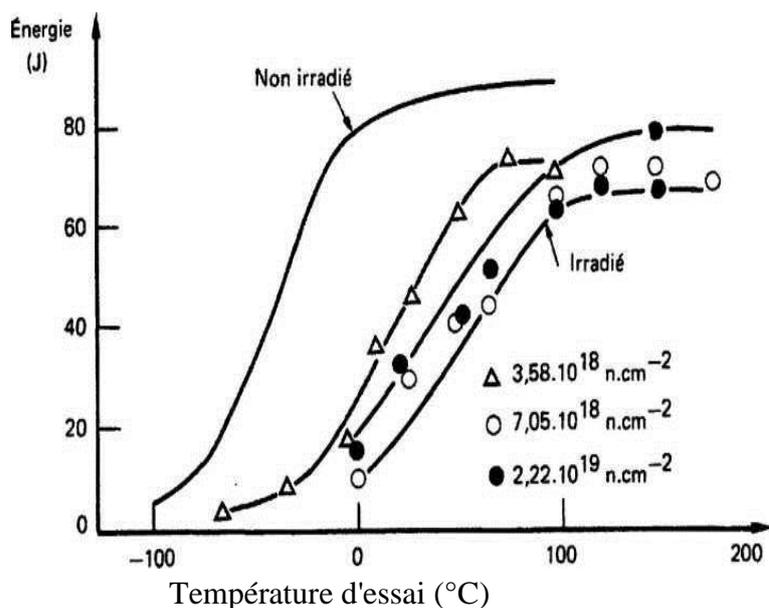
Le phénomène que l'on appelle fragilisation sous irradiation des aciers de cuve est une cinétique de développement de fragilisation. Plusieurs paramètres contrôlent cette cinétique de développement [24].

Le premier est bien évidemment la dose reçue par la cuve.

Le deuxième paramètre majeur qui contrôle le décalage de température de transition ductile-fragile est la température à laquelle est réalisée l'irradiation.

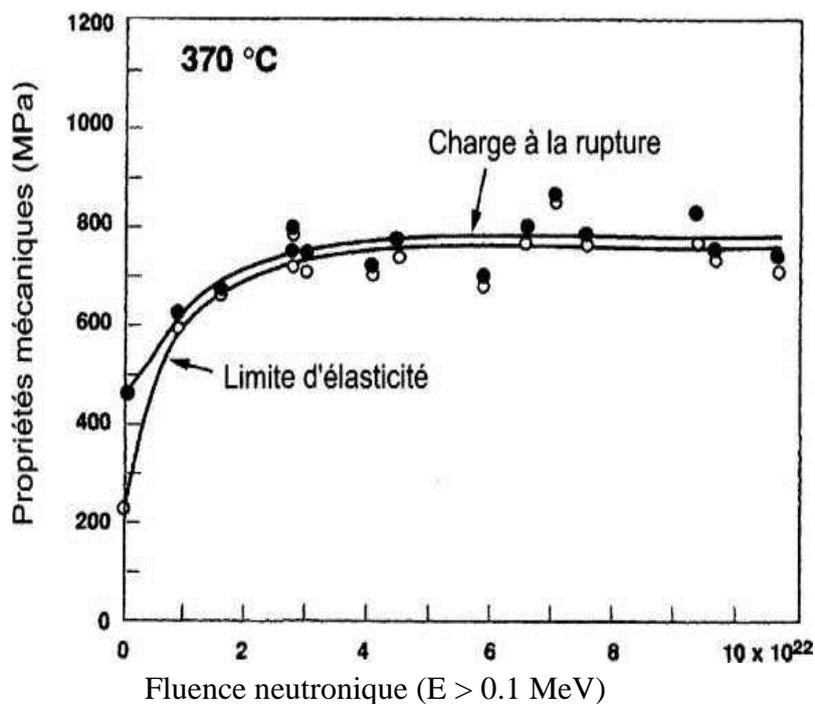
Le troisième élément majeur qui contrôle l'intensité de la fragilisation sous irradiation est la composition de l'acier. Les premiers alliages contenaient des taux relativement élevés de cuivre. On s'est aperçu que cet élément avait un rôle fragilisant important.

Évolution de la courbe de transition ductile-fragile d'un acier de cuve induite par l'irradiation et montré dans la figure (II-8).



**Figure II-8.** Évolution de la courbe de transition ductile-fragile d'un acier de cuve induite par l'irradiation [25].

La Figure (II-9) montre que pour des faibles fluences reçues par la cuve l'augmentation des propriétés mécaniques reste toujours faible, allant d'un effet non mesurable à une augmentation de 5 à 10 % de la limite d'élasticité  $\sigma_E$  [26].



**Figure II-9 :** Augmentation de la résistance mécanique induite par l'irradiation d'un acier.

## Conclusion

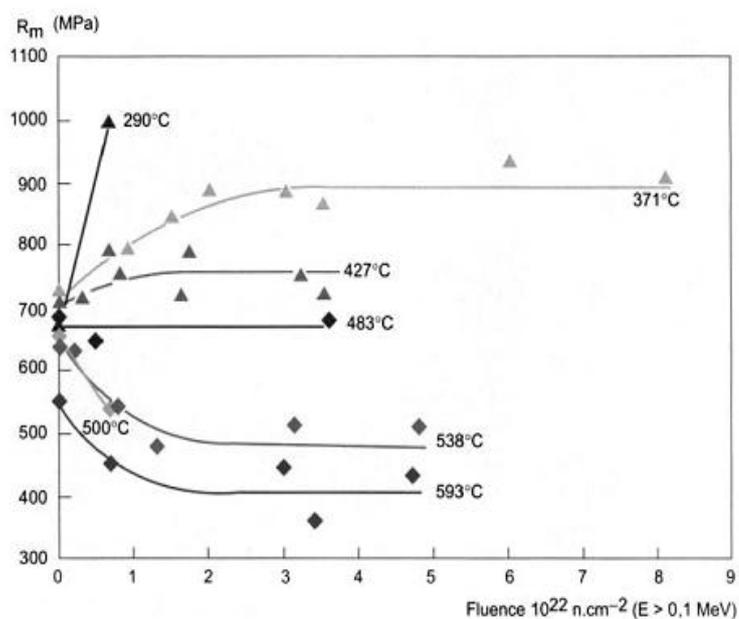
Nous avons conclu de cette application que l'irradiation influe directement sur la fragilisation des matériaux métalliques par une décroissance de l'énergie de rupture et qui suit aussi l'augmentation du flux neutronique incident et la température d'essai.

### II-5-application sur Les aciers inoxydables dans les réacteurs nucléaires de type REB

Les aciers inoxydables austénitiques utilisés pour réaliser les éléments de structure des internes des réacteurs. Ces aciers sont caractérisés par les additions typiques de 18 % Cr et 8 % Ni, subissent au long de la durée de vie prévue une irradiation correspondant à une dose totale de 2 à 100 dpa. Selon leur localisation [27].

Au cours de l'irradiation, les propriétés mécaniques du matériau évoluent de façon significative. À titre d'illustration, la figure (II-10) montre l'augmentation de la charge à la rupture testée à l'ambiante en fonction de la dose pour un acier 304 lorsqu'il est irradié à 371 °C. On peut remarquer que l'irradiation augmente la résistance mécanique assez fortement au début, puis on arrive à un état stationnaire.

L'origine de ce durcissement est liée à une évolution de la structure de dislocations initiale. Ces dislocations disparaissent peu à peu et sont remplacées par un réseau de boucles particulières, dites boucles de Frank, dont la densité peut dépasser  $10^{22} \text{m}^{-3}$  et dont le diamètre est de l'ordre de 15 nm.

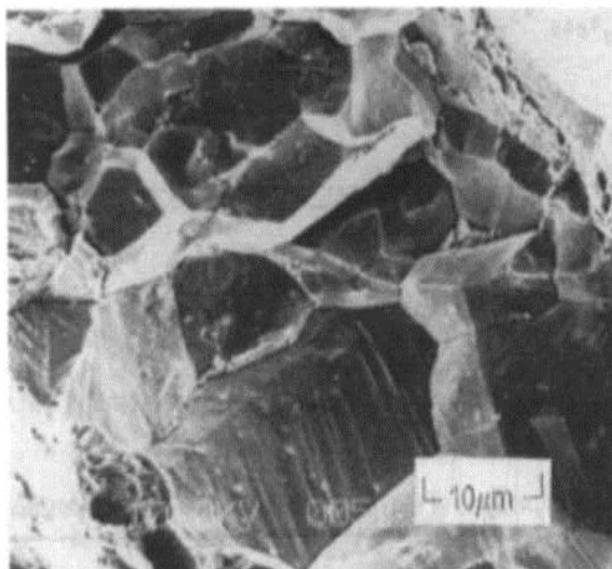


**Figure II-10 :** Évolution des propriétés mécaniques d'un acier 316 écroui de 20 %, en fonction de la température d'irradiation et de la dose reçue [28].

Le phénomène de gonflement dans les réacteurs du type RNR confirmé à fortes doses, pour les températures usuelles des internes, au vu des premiers résultats obtenus sur des aciers identiques en Russie entre 305 et 315 °C.

De plus, il faut tenir compte d'un durcissement complémentaire apporté par la formation d'hélium in situ. En effet, en neutrons thermiques, des réactions sont possibles sur le nickel. Le résultat global dépend du spectre de neutrons et qualitativement, on crée de l'ordre de 0,5 à 50 ppm d'hélium par dpa. Pour les réacteurs à eau, la relation est de l'ordre de 0,5 à 1 ppm d'hélium par dpa [29].

Pour des irradiations dans un domaine de température proche de 300 °C, L'alliage subit un appauvrissement en fer et en chrome et un enrichissement en nickel et silicium. Et ces déplacements de l'espèce chimique induite une fragilisation inter granulaire.



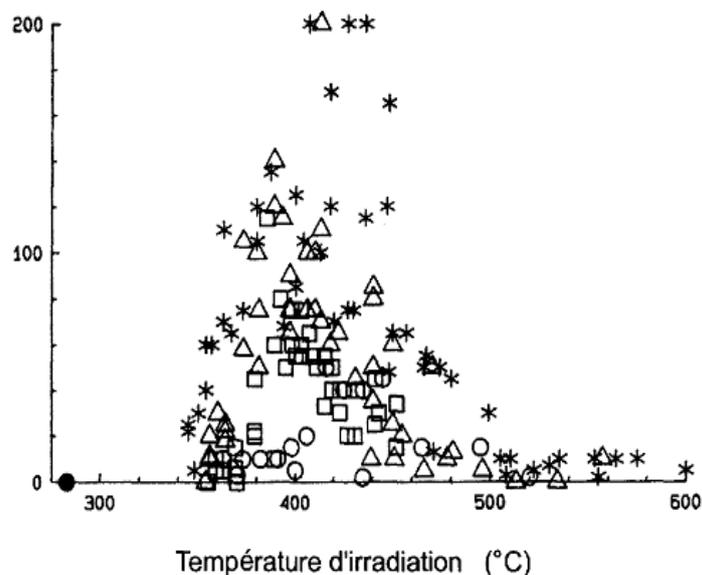
**Figure II-11** : Fissuration inter granulaire de tirants d'assemblages combustibles AGR lors d'une traction [30].

Cet appauvrissement en chrome abaissera la résistance à la corrosion de l'alliage, localement, au niveau des joints de grains. Il se développe alors facilement une fissuration inter granulaire.

En compensation de ce phénomène, des atomes vont se déplacer en sens inverse, c'est-à-dire du joint vers le centre des grains. Ce sont les espèces les plus mobiles, comme le fer et le chrome, qui quittent le joint pour compenser la diffusion des autres atomes. Le bilan est une perte de chrome au niveau du joint. Ce phénomène est marqué dans les températures

intermédiaires, de l'ordre de 300 °C, car à plus basses températures les mobilités sont trop faibles pour induire ces transports. A plus hautes températures, 480 à 500 °C, la diffusion thermique réhomogénéise de façon continue la chimie au voisinage du joint.

La figure II-9 montre le développement de ces fissures dans un tel test, en fonction de la température d'irradiation. On remarquera que le phénomène est exacerbé dans le domaine des 350 à 400 °C, qui correspond malheureusement aux températures d'utilisation.



**Figure II-9 :** Influence de la température d'irradiation sur la fissuration inter granulaire des visseries de cloisons d'internes de REB [31].

Sous irradiation neutronique, le processus décrit ci-dessus conduit à une ségrégation inter granulaire exacerbée en atomes de fer et d'oxygène, ou en chlore. Elle serait alors responsable d'une corrosion facilitée des joints de grains, par l'eau riche en oxygène des REB.

### Conclusion

Toute fissuration inter- granulaire provient de la mobilité des composants chimiques dans les joints des grains et que cet état est responsable de la fragilisation des aciers inoxydables. Nous avons aussi conclu de cette application que l'irradiation influence directement la fragilisation des matériaux métalliques par une décroissance de l'énergie de rupture et qui dépend aussi de l'augmentation du flux neutronique incident et de la température d'essai.

## **CHAPITRE III**

# **Méthodes numériques de calcul des dommages d'irradiations.**

### III-1- introduction

Pour mémoire, on rappelle que le développement des transferts d'énergie dans une cascade, selon l'approche de Kinching-Pease [32], est une approche en collision binaire. Elle permet de déterminer de façon globale le nombre de déplacements par atome pour un flux d'irradiation donné qui crée des primaires d'énergie  $E_0$ .

Les simulations par méthode de Monte Carlo consistent à étudier l'évolution d'un ion primaire et des chocs secondaires pris individuellement.

Le logiciel de référence pour ce type de calcul est le logiciel SRIM (initialement TRIM) [33] développé par Biersack. Ce logiciel calcule de façon précise, par des approximations tout à fait satisfaisantes, les interactions électroniques et les interactions nucléaires, les pertes d'énergie d'un ion de masse et d'énergie donnée au sein d'un matériau, éventuellement constitué de plusieurs couches de compositions différentes.

De façon simplifiée ce logiciel permet aussi d'obtenir rapidement des tables de pouvoirs d'arrêt électronique et nucléaire, ainsi que des distances de recul maximales.

L'intérêt de ce type de logiciel est la possibilité de visualiser les cascades et sous-cascades en projection 2D.

Comme le traitement est relativement rapide, on peut avoir une approche statistique satisfaisante en multipliant le nombre d'ions envoyés sur la cible.

Chaque collision est analysée de façon individuelle, il n'y a pas d'effet de température ni de recombinaison, ni d'évolution au cours du temps de la morphologie de la cascade [34].

### III-2- La modélisation des défauts

La perte d'énergie cinétique peut se faire soit par collision inélastique soit par collision élastique selon la gamme d'énergie de l'ion incident et de sa masse.

Les collisions élastiques, quant à elles sont responsables de l'endommagement cristallin du réseau, en créant surtout des paires de Frenkel [35].

Dans le but d'estimer le nombre d'atomes déplacés par ion, les formules de Kinchin-Pease ont été d'abord développées, en se basant sur un calcul local.

#### III-2- 1-La méthode de Kinchin-Pease [32]

La méthode de Kinchin-Pease détermine le nombre d'atomes déplacés dans le matériau par le calcul suivant :

$$N(E) = E_n / 2 \cdot E_d$$

Où  $E_n$  est l'énergie perdue par chocs nucléaires  $E_d$  est l'énergie de seuil de déplacement des atomes du matériau.

Ce modèle considère que l'ion incident augmente le nombre de particules en mouvement, uniquement si son énergie est supérieure à  $2 \cdot E_d$ . Si elle inférieure, l'atome sera délogé hors de son site, mais l'ion incident perdra au moins une énergie égale à  $E_d$ , et il sera stoppé [36].

Le nombre de particules en mouvement restera donc le même dans le matériau. Ce modèle n'est en fait qu'une approximation locale de l'endommagement, qui néglige les trajectoires des atomes éjectés, la séparation spatiale des profils de lacunes et d'interstitiels, et leur éventuelle recombinaison.

### III-2- 2-La simulation monte-Carlo [37]

Plusieurs auteurs ont affiné le modèle de Kinchin-Pease, en l'adaptant à la simulation du type Monte-Carlo.

Hobler [38] a étudié le domaine énergétique allant jusqu'aux centaines de KeV. Des calibrations dans le domaine des MeV par Lulli [39] : il a été observé des macros défauts dans le matériau implanté. Cet effet a été attribué à L'explosion de Coulomb, d'origine purement électronique.

Selon le modèle de Kinchin-Pease [32] modifié, le nombre d'atomes déplacés par collisions nucléaires est formulé de la façon suivante :

$$N(E) = v \cdot E_n / 2 \cdot E_d$$

Le paramètre  $v$  est appelé facteur d'endommagement. Il dépend de la section de capture et des potentiels interatomiques. Une valeur typique de 0.8 existe, qui varie selon les auteurs Sigmund [40].

### III-2- 3-Le code TRIM [33]

Dans le programme standard TRIM, l'énergie transférée à un atome-cible est analysée pour :

- l'ionisation induite par les atomes repoussés
- le nombre de lacunes et d'interstitiels créés suite à une cascade de collisions
- le nombre de collisions transférant des énergies inférieures à  $E_d$  et qui produisent des

phonons.

Le code TRIM couple deux méthodes :

Celle de Kinchin-Pease modifiée pour les calculs locaux et Celle de la cascade de collisions (le suivi des atomes individuels reculés jusqu'à ce que leur énergie devienne inférieure à  $E_d$ . Cette dernière donne directement la distribution spatiale des défauts (Ziegler) [41].

Il nous est donné le principe de ce raisonnement.

Soient respectivement  $(Z_1, Z_2)$  le numéro atomique de l'ion et de l'atome cible ainsi que leur énergie  $(E_1, E_2)$  après collision.

! Si  $E_2 > E_d$  l'atome bousculé a assez d'énergie pour quitter son site : c'est un déplacement.

\*Si en plus,  $E_1 > E_d$ , l'ion incident quitte également son site. Et l'atome cible devient une particule incidente d'énergie égale à :  $E_2$  moins son énergie de liaison cristalline.

\*Si  $E_1 < E_d$ , deux cas de figure peuvent se présenter :

$Z_1=Z_2$ , l'ion incident reste sur le site n c'est une collision de remplacement

$Z \neq Z_2$ , l'ion devient substitutionnel (et électriquement actif)

!! Si  $E_2 < E_d$ , l'atome éjecté n'aura pas suffisamment d'énergie et il retournera à son site en créant des phonons [42].

\*Si en plus  $E_1 < E_d$ , l'ion devient interstitiel tout en produisant des phonons. Ce qui chauffe le matériau.

Le matériau est considéré comme un arrangement d'atomes au repos. Tant que l'énergie de l'ion incident, et des atomes déplacés par la suite, est supérieure à l'énergie de liaison  $E_d$  (10-20 eV) il y a suite de collisions [43].

Les atomes qui se rencontrent sont beaucoup plus proches l'un de l'autre que des autres atomes dans la cible; on considère alors les cascades de collisions comme une suite de collisions binaires.

Si l'énergie transférée devient inférieure à l'énergie de liaison il y a simplement vibration thermique et émission de phonons.

### III-3- Le phénomène de pulvérisation ou sputtering

Le phénomène de pulvérisation résulte du fait qu'aux énergies mises en jeu ( $< 100$  keV), une cascade de collisions se termine souvent à la surface. Les atomes de surface sont alors éjectés vers le vide [44].

Le calcul analytique du rendement de pulvérisation  $Y$  dépend de l'interaction ion- atomes cibles, et donc essentiellement du pouvoir d'arrêt nucléaire.

Quatre étapes interviennent

- détermination de l'énergie déposée lors du premier choc ion/atome
- détermination du nombre d'atomes mis en mouvement dans la cible (cascade),
- détermination du nombre d'atomes qui sont reculés vers la surface, .Détermination du nombre d'atomes de surface ayant suffisamment d'énergie pour vaincre l'énergie de liaison de surface et être éjectés vers le vide [45].

On voit apparaître ici une autre variable,  $U_s$ , qui est l'énergie de liaison, assimilée à l'énergie de sublimation.

SIGMUND [46] utilisant le formalisme de la théorie de transport (équation de type BOLTZMANN) [47] donne l'expression  $d^3N$  des atomes reculés (par ion incident) arrivant à la surface dans l'intervalle d'énergie ( $E_0, E_0 + dE_0$ ), dans un angle solide  $d\omega$ , et avec une inclinaison  $\Psi_0$  par rapport à la normale à la surface:

$$\frac{dN}{(d\omega dE)} = \frac{3\alpha S_n(E_p) \cos \psi_0}{2\pi C_0 E_0^2}$$

$\Psi_0$  l'angle d'inclinaison de flux.

$N$  est le nombre des ions accéléré.

$E$  est l'énergie des ions incidents

$d\omega$  angle solide.

$\alpha$  Est un nombre sans dimension qui dépend du rapport  $M_2/M_1$  et de l'angle  $\theta$  d'incidence des ions primaires par rapport à la normale à la surface ;

$E_p$  est l'énergie primaire ;

$C_0$  est une constante qui dépend de la section efficace d'interaction:  $C_0 = 1,81 A^0 = 1,81 \cdot 10^{-16} \text{ cm}^2$  [48].

En fait la valeur de  $\alpha$  serait surestimée d'un facteur 2 pour :  $2 < M_2/M_1 < 5$ .

Une meilleure approximation serait :

$$\alpha = 0.15 + 0.13 M_2/M_1.$$

Sigmund considère une barrière de potentiel plane à la surface et, en intégrant l'expression de  $(d^3N/ d\omega_0 dE_0)$  pour toutes les énergies  $E_0$  supérieures ou égales à  $U_s$ , arrive à l'expression :

$$Y(E_p) = \frac{3\alpha S_n(E_p)}{4\pi c_0 U_s}$$

$E_p$  est l'énergie primaire

$\alpha$  Est un nombre sans dimension qui dépend du rapport  $M_2/M_1$  et de l'angle  $\theta$  d'incidence

$S_n$  la section efficace de ralentissement nucléaire

$C_0$  est une constante qui dépend de la section efficace d'interaction

$Y$  est le rendement de pulvérisation

$U_s$  est l'énergie de liaison

Cette formule valable si  $E_p \geq 1$  keV.

Si  $E_p < 1$  keV on aurait plutôt :

$$Y(E_p) = \frac{3\alpha M_1 M_2 E_p}{2(M_1 + M_2)^2 U_s}$$

$M_1$  est la masse de l'ion

$M_2$  est la masse de l'atome cible

Le fait important est que  $Y$  est proportionnel à la section efficace de ralentissement nucléaire  $S_n(E)$  est inversement proportionnel à l'énergie de liaison  $U_s$ , ou énergie de sublimation.

Variation de  $Y$  en fonction de l'angle d'incidence des ions primaires.

Selon Sigmund la dépendance de  $Y$  en fonction de  $\theta$  est contenue dans  $\alpha$ .

On aurait une variation de la forme :

$$y(\theta) = y(0) / (\cos \theta)^n$$

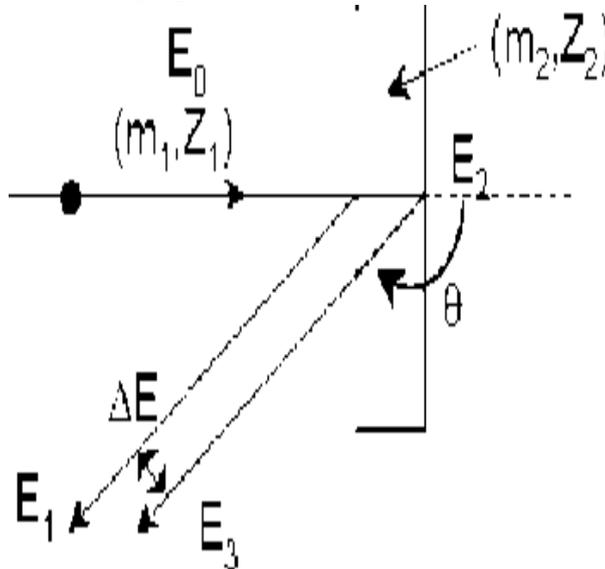
Avec  $n$  dépendant de  $M_2/M_1$ , soit:

$$n = 5/3 \text{ si } M_2/M_1 < 3$$

$$n = 1 \text{ si } M_2/M_1 > 3.$$

### III-4- Le phénomène de rétrodiffusion

Pour une couche mince a un seul élément comme la figure suivant (figure III-1) le projectile diffusé ne produit que des collisions simples ou la section efficaces de rétrodiffusion sont très faibles [49].



**Figure III-1** un projectile rétrodiffusé par des collisions [50].

Le projectile perd de l'énergie dans la cible (par frottement dans le gaz d'électrons)

On peut représenter par ailleurs le rendement de diffusion par la formule suivante :

$$N = Q n \Delta x \left( \frac{d\sigma}{d\Omega} \right) E_0 \Delta\Omega \quad \text{avec} \quad \left( \frac{d\sigma}{d\Omega} \right) E_0 = \frac{(Z_1 Z_2 e^2)^2}{E_0^2 \sin^4(\theta/2)}$$

**Q** est la charge mesurée sur l'échantillon apportée par le faisceau.

**$\Delta\Omega$**  est l'angle solide du détecteur.

**N** est le nombre de particules rétro diffusées.

**n** est la densité atomique de l'échantillon.

$\left( \frac{d\sigma}{d\Omega} \right) E_0$  est la section efficace de Rutherford [51].

Cette section efficace est exacte ce qui rend la méthode quantitative.

Cette méthode permet, par la mesure de l'aire des pics de déterminer un nombre d'atome

par unité de surface  $n\Delta x$ .

Il est souvent inutile de mesurer  $Q$  et  $\Delta\Omega$ .

### III-5-Simulation par le logiciel SRIM du système binaire Fe-B

#### III-5-1-Lechoix du système binaire Fe-B

Nous avons choisi le système Fe-B par ces caractéristiques physico-chimiques et par ces propriétés mécaniques et radioactifs, l'élément d'addition Bor on le retrouve aussi bien en mécanique qu'en électronique. En mécanique dans le traitement des surfaces (anti corrosif), et dans l'amélioration des propriétés de dureté des aciers.

La diffusion du bore dans des aciers donne naissance à des phases type FeB et Fe<sub>2</sub>B.

Les principales caractéristiques physico-chimiques de borures FeB et Fe<sub>2</sub>B sont présentées dans le tableau suivant :

Propriétés	Fe <sub>2</sub> B	FeB
Température de fusion (°C)	1390	1550
Température de curie (°C)	742	325
Conductibilité thermique (W/m °C)	20-30	10-20
Résistivité électrique (p, Q/m)	1000	2000
Module d'élasticité (GPa)	590	285
Ténacité KIC (MPa <sup>1/2</sup> )	3.3	2.7
Dureté (HV) 1800-2000	1800-2000	1900-2100

**Tableau III-1** : Les propriétés physico-chimique des borures FeB et Fe<sub>2</sub>B

La boruration est un procédé permettant de produire des couches très résistantes à l'usure par abrasion et adhésion, à la corrosion atmosphérique ainsi qu'à l'attaque par les acides et les métaux fondus.

La boruration peut être appliquée aux métaux ferreux, aux métaux non ferreux. Le procédé de la préparation ce fait par l'implantation ionique ou par des procédures thermiques consiste à maintenir les pièces à borures entre 700 et 1000 °C pendant 1 à 12 heures en contact avec du bore contenu dans une substance gazeuse, liquide ou solide. Ainsi, le bore se dépose en surface par réduction chimique ou électrochimique, diffuse à l'intérieur du substrat, puis réagit avec le métal de base pour former des borures.

Toutes ces méthodes présentent des inconvénients majeures : durée, la température, la pollution, la toxicité des réactifs c'est ainsi que pour éviter ces problèmes Nous proposons comme procédé de substitution l'implantation ionique

L'implantation ionique du bor dans le fer est un procédé qui consiste à modifier la composition superficielle des matériaux cible en faisant pénétrer des ions de bor possédant une énergie suffisante.

Cette méthode a été utilisée depuis longtemps dans l'industrie électronique à partir de 1971, le procédé fût industrialisé pour la fabrication des circuits intégrés. Proposé dès 1973 pour des applications mécaniques, il fût utilisé avec succès. Des applications ont vu le jour dans l'industrie mécanique, aéronautique, biomédicale.

### **III-5-2-Résultats de simulation et Interprétation**

Pour nos simulations nous avons utilisé Le logiciel SRIM [33] (stopping range ions matter) est un logiciel qui suit le programme standard TRIM, nous rappelons que :

Dans le programme standard TRIM, l'énergie transférée à un atome-cible est analysée

Pour :

- l'ionisation induite par les atomes repoussés.
- le nombre de lacunes et d'interstitiels créés suite à une cascade de collisions.
- le nombre de collisions transférant des énergies inférieures à  $E_d$  et qui produisent des phonons.

Le code TRIM couple deux méthodes :

Celle de Kinchin-Pease modifiée pour les calculs locaux Celle de la cascade de collisions (le suivi des atomes individuels reculés jusqu'à ce que leur énergie devienne inférieure à  $E_d$ ).

Cette dernière donne directement la distribution spatiale des défauts Ziegler, Il nous est donné le principe de ce raisonnement.

Le logiciel utilisé pour ces simulations se présente sous forme d'une boîte noire qui à partir de données initiale telles que :

- choix sur l'angle d'incidence
- choix de l'ion incident
- choix de la cible
- choix de l'énergie
- choix de l'épaisseur

Nous informe des résultats expérimentaux par valeurs numériques et par tracés de graphes

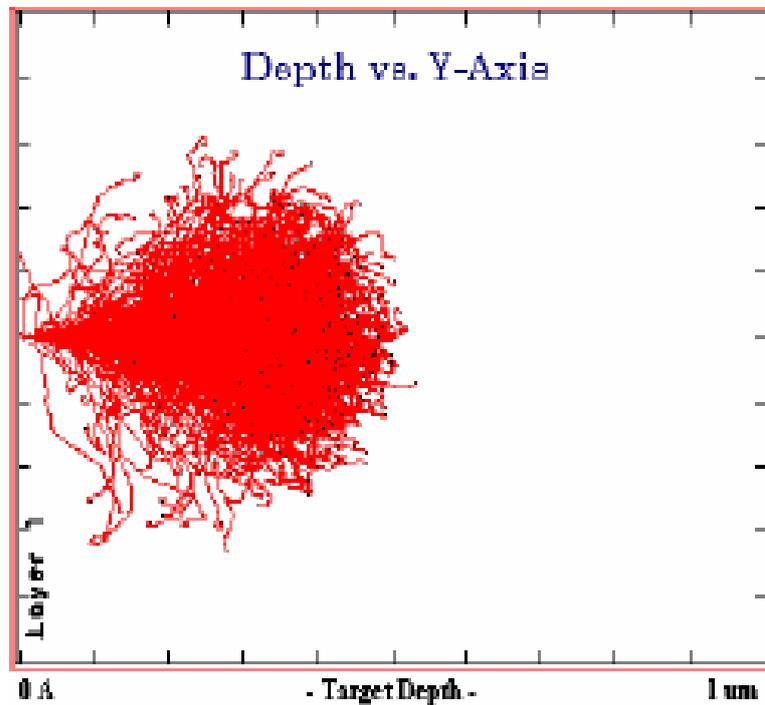
Le schéma qui suit décrit le tableau des données tableau III.1.

Ion				Target Data				Calculations parameters	
Ion type	A X z		A uma	A X into layer Z (1 atom)				Backscattered Ions	
Ion Energy			KeV	Layer Now	widht	density	A Y A <sup>0</sup> Z Solid/ gaz	Transmitted Ions	
Ion angle			Degree	Layer1			solid	Vacancies / Ion	
completed				Lattice binding energy				Ion stats	Range A <sup>0</sup>
Show Live Data				Surface binding energy				longitudinal	
Plots				Displasments Enrgy				Lateral progection	
0	A <sup>0</sup>		A <sup>0</sup>					Radial	
Max Target dept								Type of damage calcultion	
Collision plots									Quick kinchin pease
	XY longitudinal		All					Stopping power version	
	XZ longitudinal		none						Srim 2003
	XZ laeral		clear					Energy loos	Ion rcoil
Back ground								Ionizatin	
File Plots	Ion distribution							Vacancies	
	Ion recoil distribution							Sputtering yield	
	Lareral range								eV /Atom
	Ionization							Total	
	Phonon							A Y Z	
	Energy to recoils								Save every
	Damage events							Random	

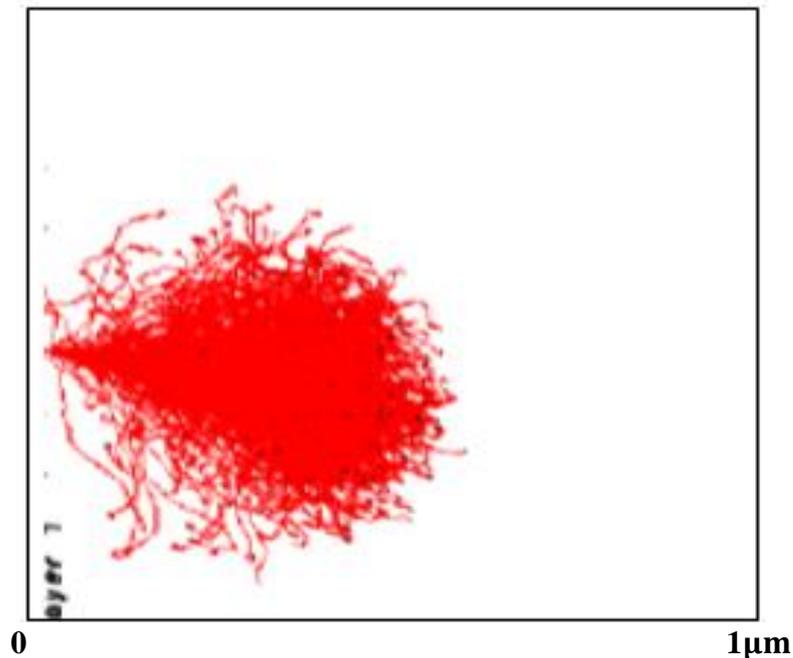
**Tableau III.2 :** le tableau des donnés dans le logiciel SRIM [52].

**III-5-2-1-L'étude de trajectoire on fonction de l'angle d'incidence**

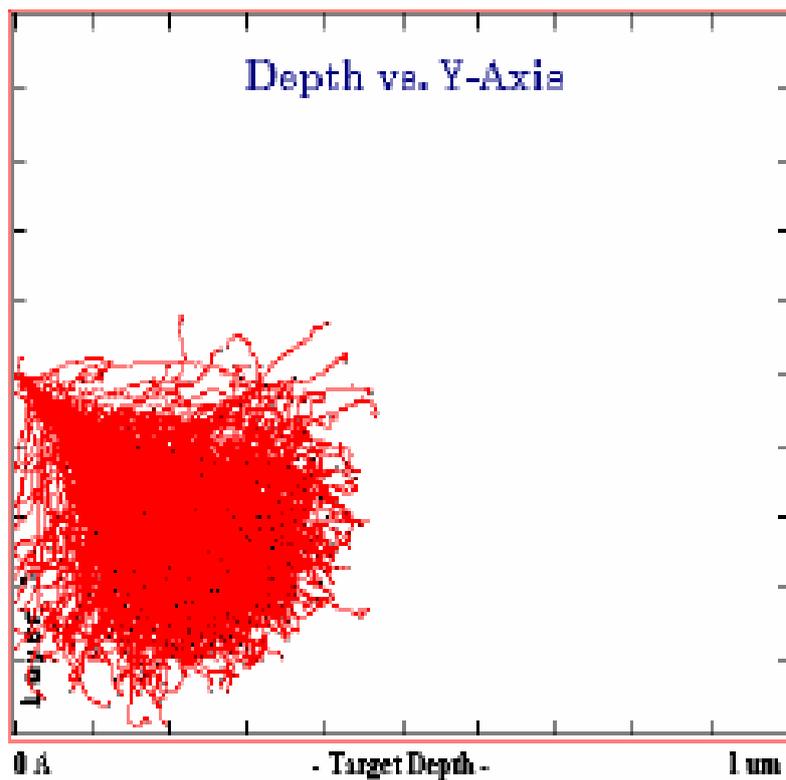
Par l'étude de la variation de trajectoire d'ion incidente en fonction de l'angle d'incidence nous avons trouvé les figures suivantes : Figure III.2 Figure III.3 Figure III.4 Figure III.5



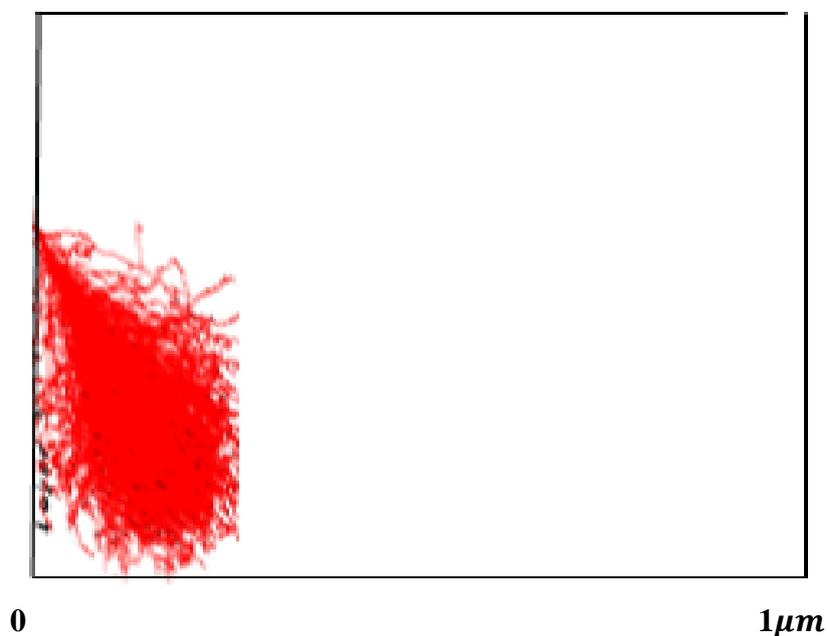
**Figure III.2** Trajectoires des Ions de Bore dans Fe pour une énergie=600 KeV et un angle d'incidence=0°



**Figure III.3** Trajectoires des Ions de Bore dans Fe pour une énergie=600 KeV et un angle d'incidence=30°



**Figure III.4.** Trajectories des Ions de Bore dans Fe pour une énergie=600 KeV et un angle d'incidence=60°



**Figure III.5.** Trajectories des Ions de Bore dans Fe pour une énergie=600 KeV et un angle d'incidence=80°

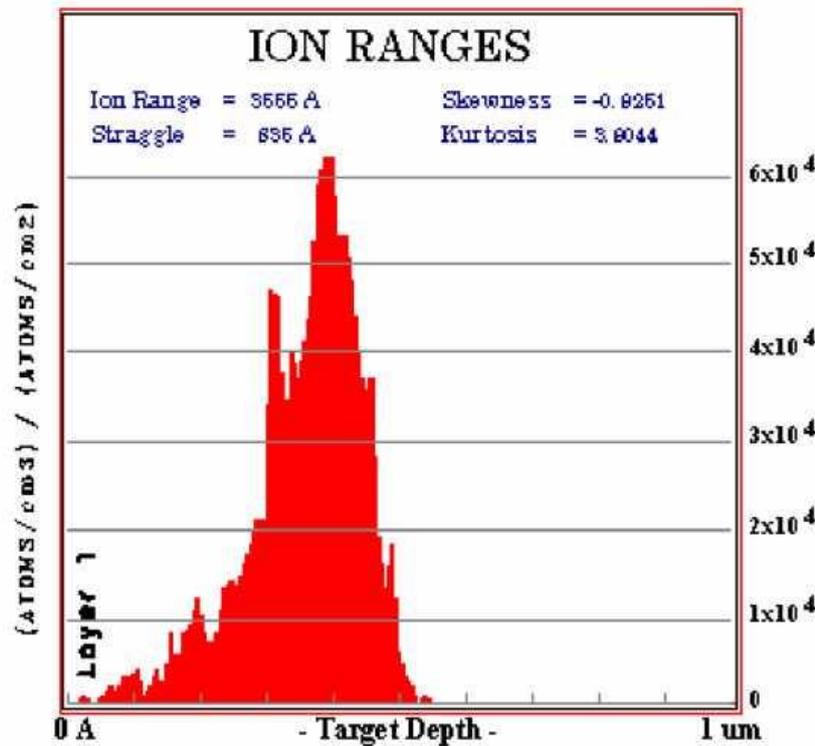
Nous avons constaté que les collisions nucléaires qui dévient l'ion de sa trajectoire initiale est un processus Stochastique défini par l'inclinaison des trajectoires des ions de bore dans le fer.

La longueur de pénétration diminue avec augmentation de l'angle d'incidence parce que le phénomène de diffusion dans le matériau est plus facile pour les petites angles puisque la taille des ions de bore est très inférieures que celle de l'atome de fer, et le transfert d'énergie est très grand.

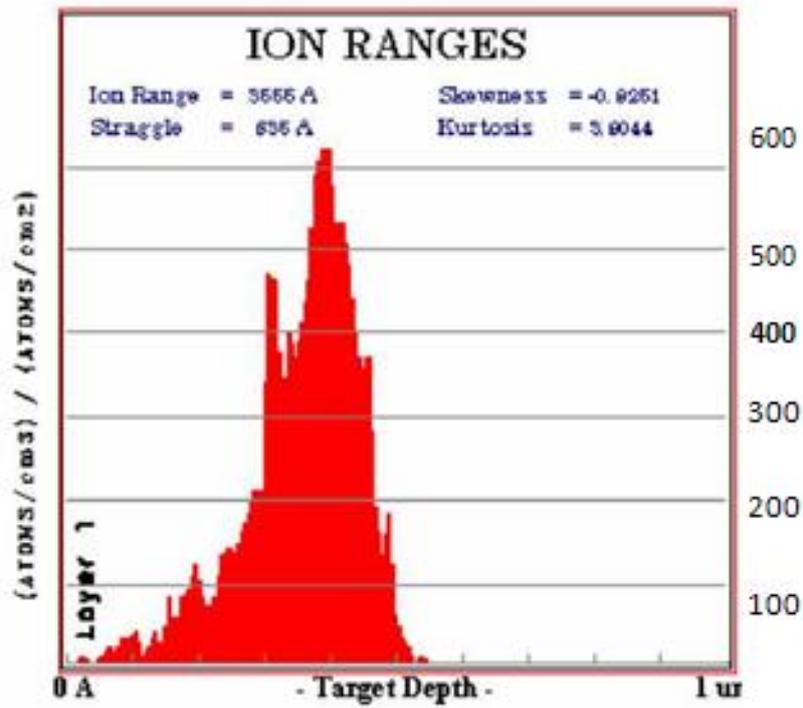
On constate aussi que la concentration des atomes de bore augmente avec la longueur de pénétration par le système de freinage dans le matériau de fer.

### III-5-2-2-L'étude de la longueur de pénétration en fonction de flux

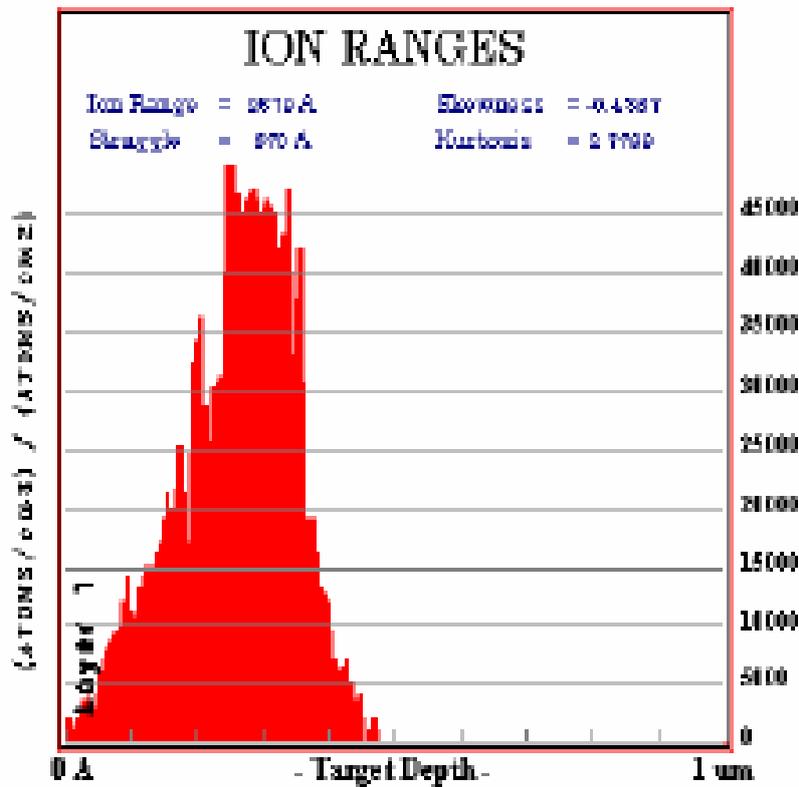
Par l'étude de la variation de distribution des ions de bore en fonction de la longueur de pénétration et pour différents angles d'incidences nous avons trouvé les figures suivantes : Figure III.6 Figure III.7 Figure III.8 Figure III.9



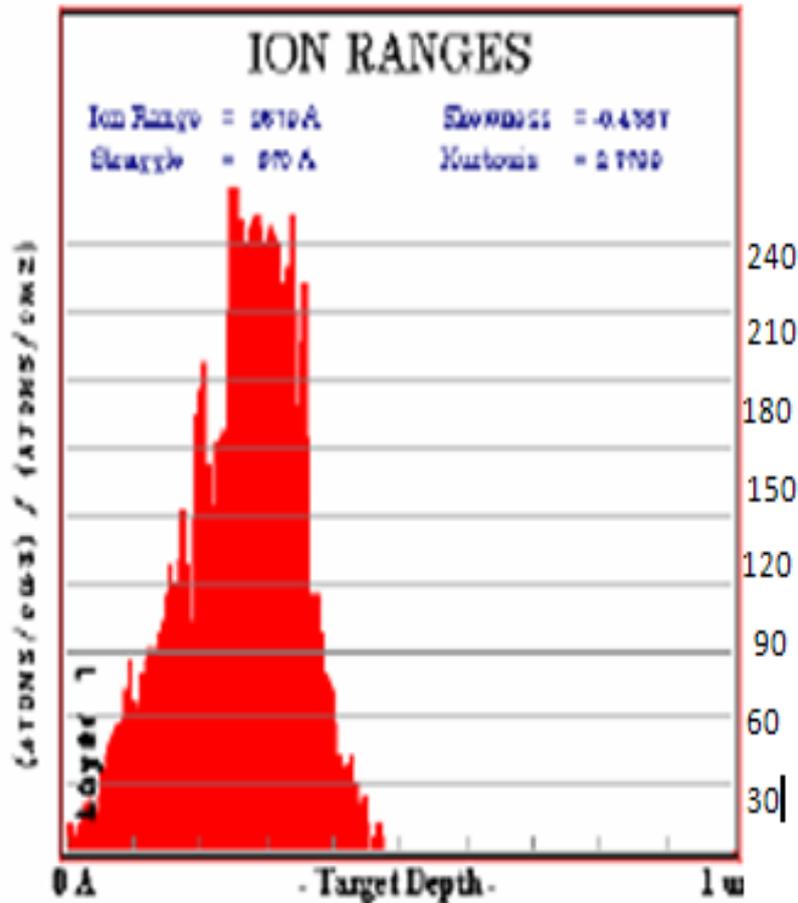
**Figure III.6** Distribution des Ions de Bore dans Fe pour une énergie=600 KeV et un angle d'incidence=0°



**Figure III.7** Distribution des Ions de Bore dans Fe pour une énergie=600 KeV et un angle d'incidence=30°



**Figure III.8.** Distribution des Ions de Bore dans Fe pour une énergie=600 KeV et un angle d'incidence=60°



**Figure III.9.** Distribution des Ions de Bore dans Fe pour une énergie=600 KeV et un angle d'incidence=80°

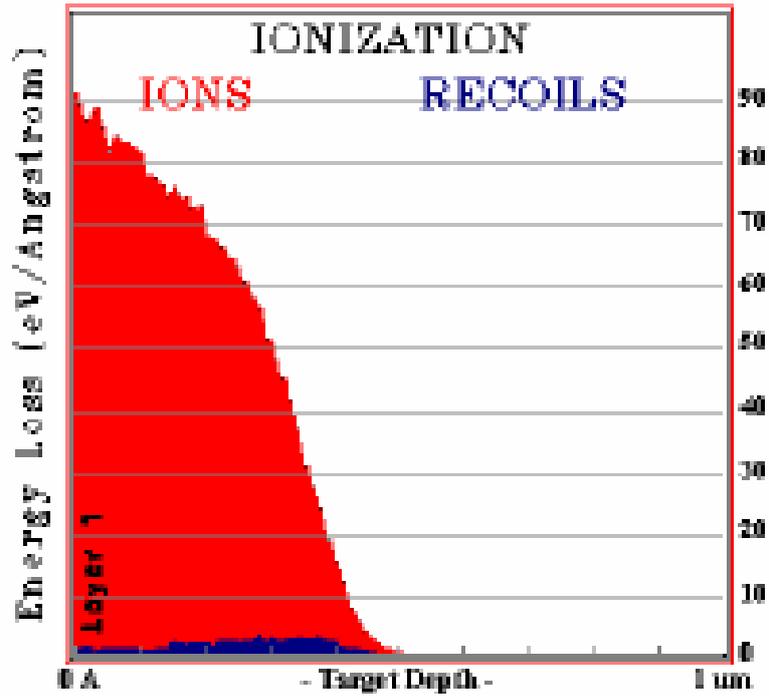
On peut constater que La position finale de l'ion est donnée par une distribution de probabilité de type gaussienne.

Pour une même énergie, on trouve que le parcours est plus court quand l'angle d'incidence augmente par suite de la rétrodiffusion des ions de bor, et contrairement quand l'angle diminue la diffusion est plus facile et dominante dans ce cas.

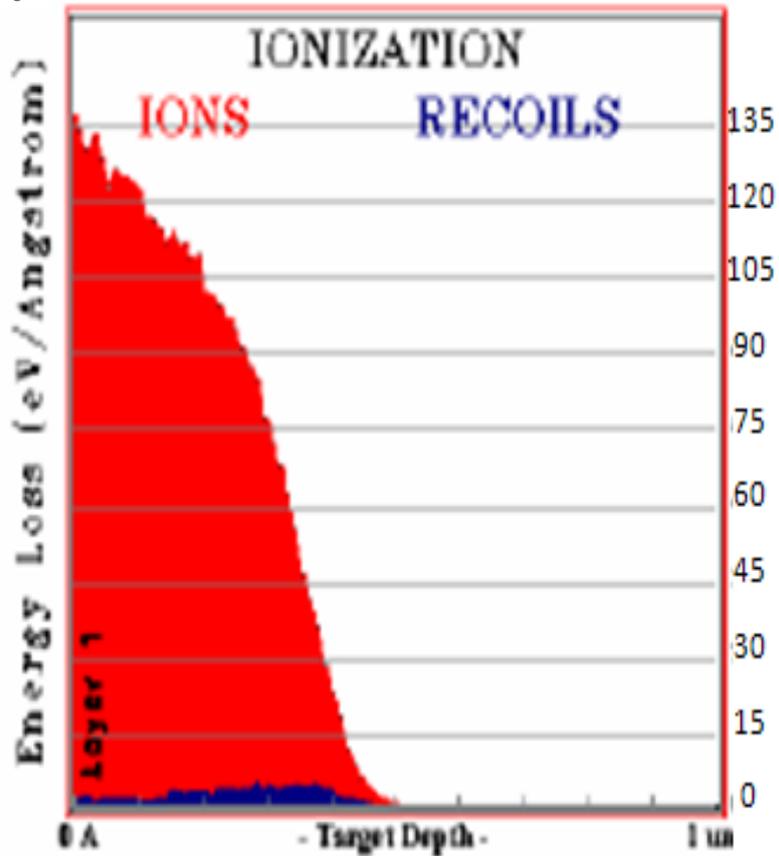
### III-5-2-3-L'étude d'ionisation en fonction de l'angle d'incidence

Par l'étude de la variation de l'ionisation des ions de bor et les atomes cibles en fonction de l'angle d'incidence nous avons trouvé les figures suivant :

Figure III.10 Figure III.11 Figure III.12 Figure III.13



**Figure III.10** Ionisation des ions de Bore et Fe pour une énergie=600 Ke V et un angle d'incidence=0°



**Figure III.11.** Ionisation des ions de Bore et Fe pour une énergie=600 KeV et un angle d'incidence=30°

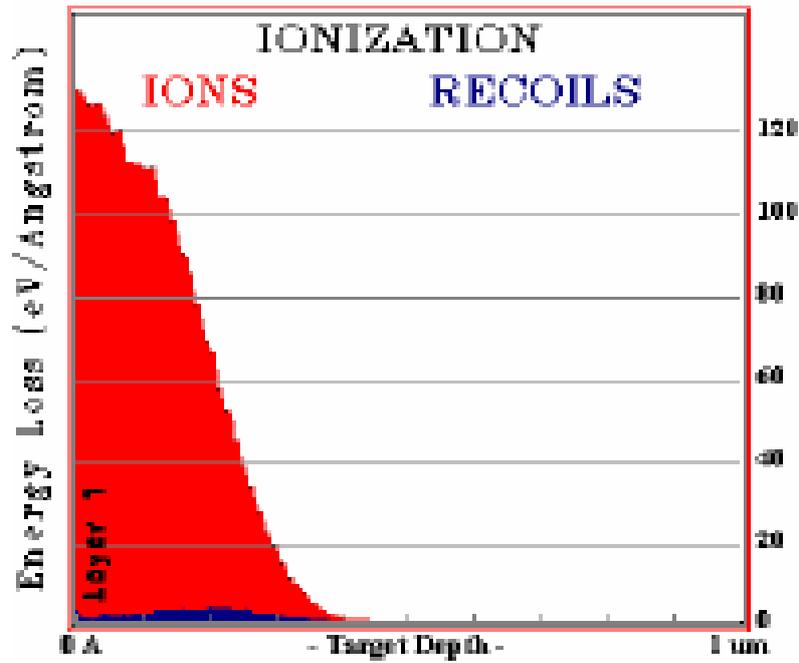


Figure III.12 Ionisation des ions de Bore et Fe pour une énergie=600 Ke V et un angle d'incidence=60°

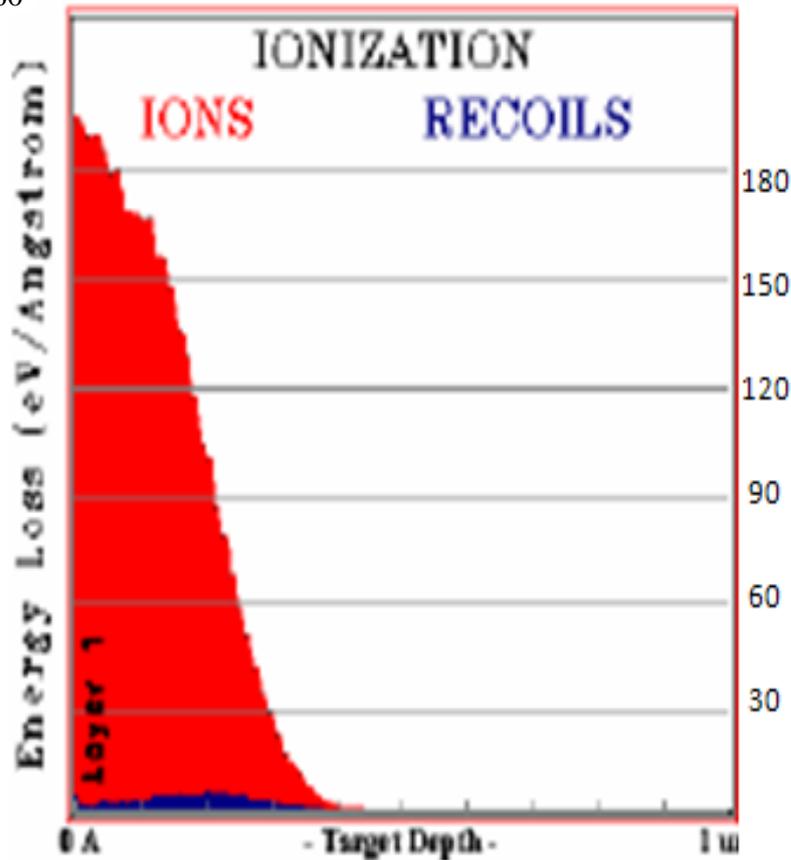


Figure III.13 Ionisation des ions de Bore et Fe pour une énergie=600 Ke V et un angle d'incidence=80°

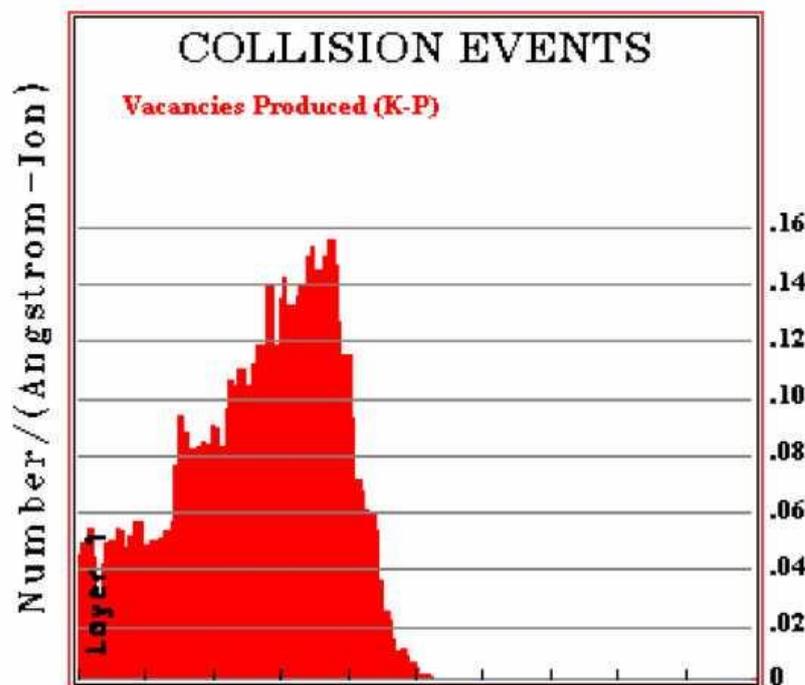
On s'aperçoit que l'énergie perdue au cours de l'ionisation augmente en fonction de l'angle d'incidence au surface du matériau mais à l'intérieure on peu voire la diminution rapide de l'ionisation par ce que le nombre des collisions élastiques augmentes avec la profondeur dans le fer.

Donc la perte d'énergie électronique est dominante pour les grandes angles d'incidences sur la surface extérieure du métal et au milieu intérieure on aura des pertes d'énergie nucléaire donc les interactions entre les ions de bor et les atomes de fer se sont des transferts d'énergie qui va créer des mouvements des atomes cibles et aussi l'apparussions des défauts ponctuels.

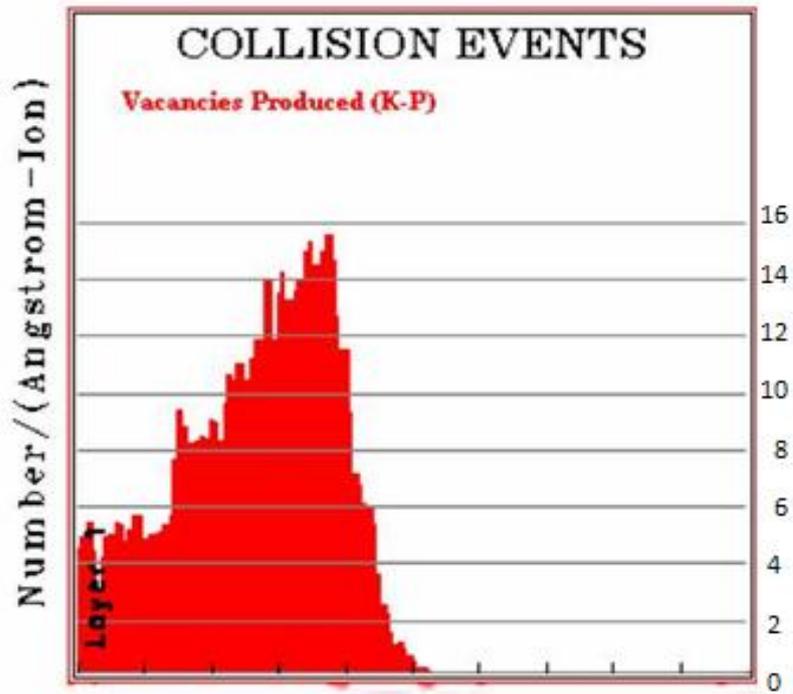
La diffusion inélastique est très considérable surtout dans les couches extérieures du métal, Et augmente aussi avec l'augmentation de l'angle d'incidence.

#### III-5-2-4-L'étude de nombre de défauts en fonction de l'angle d'incidence

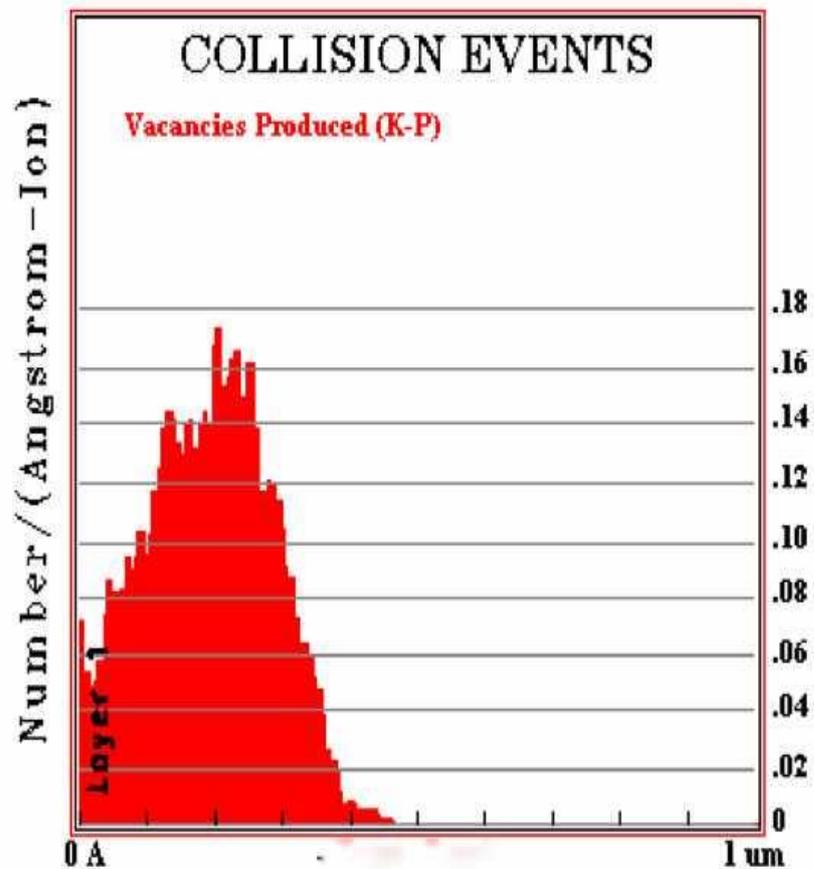
Par l'étude de la variation de nombre des défauts créés en fonction de l'angle d'incidence et de la longueur de pénétration nous trouvé les figures suivant : Figure III.14 Figure III.15 Figure III.16 Figure III.17



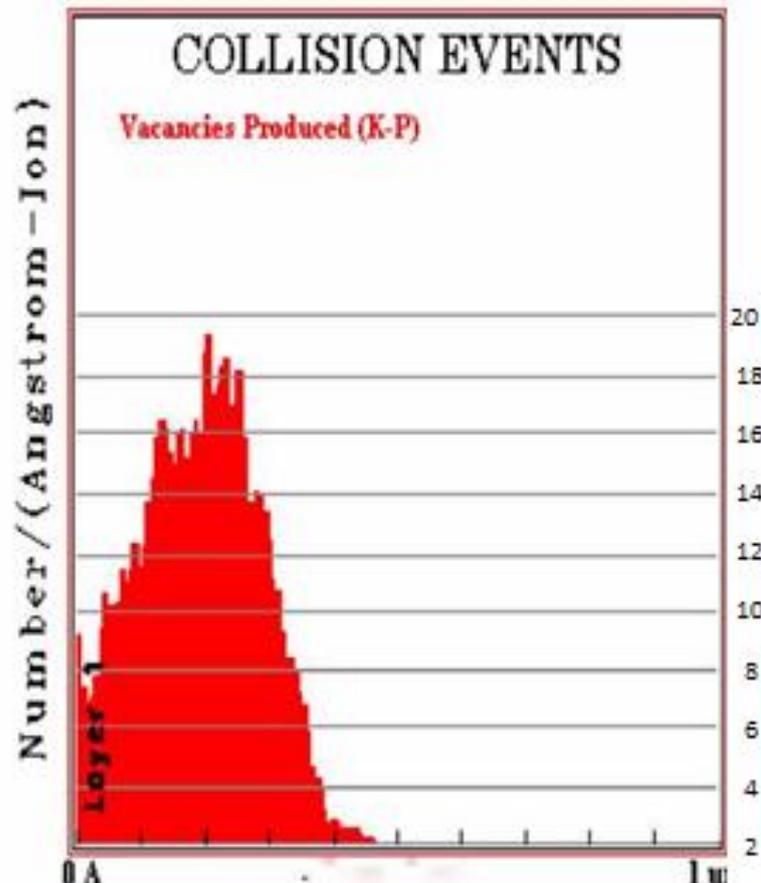
**Figure III.14** Nombre de défauts créés pour une énergie=600 KeV et un angle d'incidence=0°



**Figure III.15** Nombre de défauts créés pour une énergie=600 KeV et un angle d'incidence=30°



**Figure III.16** Nombre de défauts créés pour une énergie=600 KeV et un angle d'incidence=60°



**Figure III.17** Nombre de défauts créés pour une énergie=600 KeV et un angle d'incidence=80°

On s'aperçoit que la distribution des défauts est plus importante quand l'angle d'incidence augmente surtout à l'intérieure du métal puis que Seules les collisions nucléaires sont responsables de la création de défauts, soit à la suite des chocs primaires avec l'ion incident, soit à la suite des chocs secondaires avec un atome de la cible en mouvement issue d'un choc primaire ou secondaire.

Les défauts créés par l'implantation ionique sont des défauts ponctuels. En effet, il ne s'agit que de perturbations locales au niveau atomique.

Les défauts majoritairement créés sont des paires de Frenkel (couple interstitiel+lacune).

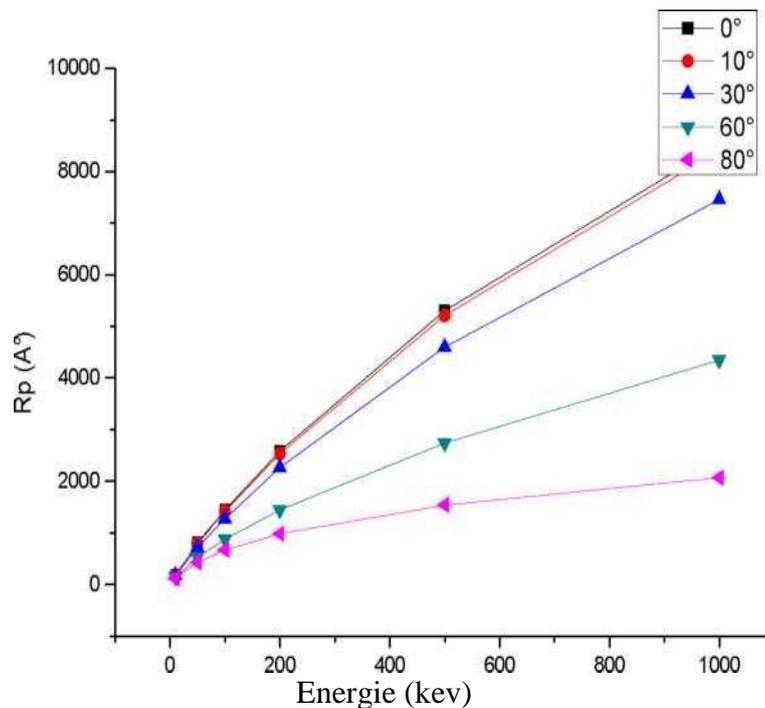
De nombreuses paires de Frenkel sont immédiatement annihilées (interstitiel voisin d'une lacune), la structure cristallographique n'est pas totalement détruite.

Après l'implantation ionique toutefois, de nombreux défauts subsistent. Le nombre de défauts dépend de la vitesse de création des défauts (dose implantée, intensité du faisceau, profondeur de pénétration) et de la vitesse d'annihilation (donc de diffusion) des paires de

Frenkel dans le matériau, les atomes de Bore de petite taille vont diffuser facilement dans le matériau.

### III-5-2-5-L'étude de Profondeur de pénétration en fonction de l'énergie

Par l'étude de la profondeur de pénétration des ions de bor dans le fer en fonction de leur énergie et pour différents angles nous avons trouvé la figure suivante Figure III.18



**Figure III.18** : Profondeur de pénétration en fonction de l'énergie pour différents angles d'incidence

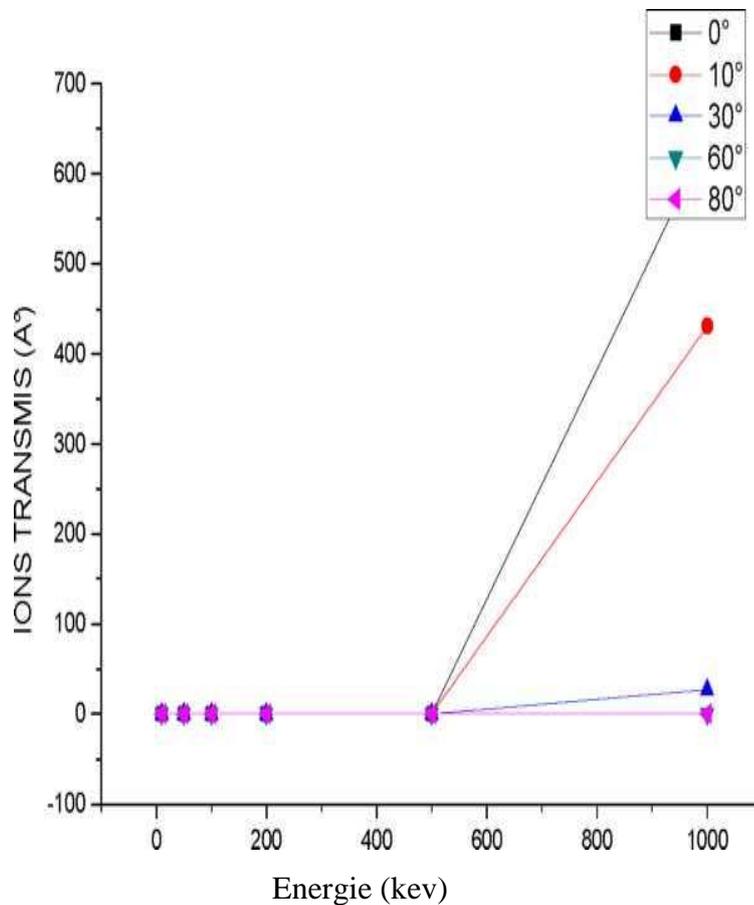
La profondeur augmente avec l'énergie Parce que la majorité des ions diffusent dans le fer et si l'énergie diminue les ions ne peuvent pas pénétrer et leur trajectoire est très courte.

On peut constater aussi que lorsque l'angle d'incidence augmente la profondeur de pénétration diminue puisque le nombre d'ions rétrodiffusé est plus grand donc moins de chance de pénétrer dans le matériau.

Et au contraire si l'angle diminue les ions ont plus de pouvoirs pour traverser le réseau des atomes de fer et avec des collisions élastique qui provoque des modifications de la trajectoire au cours du temps.

### III-5-2-6- l'étude du nombre d'ions transmis en fonction de l'énergie

Par l'étude du nombre d'ion transmis l'énergie avec les atomes de fer en fonction de leur énergie et pour différents angles nous avons trouvé la figure suivante Figure III.19



**Figure III.19:** Ions transmis en fonction de l'énergie pour différents angles d'incidence

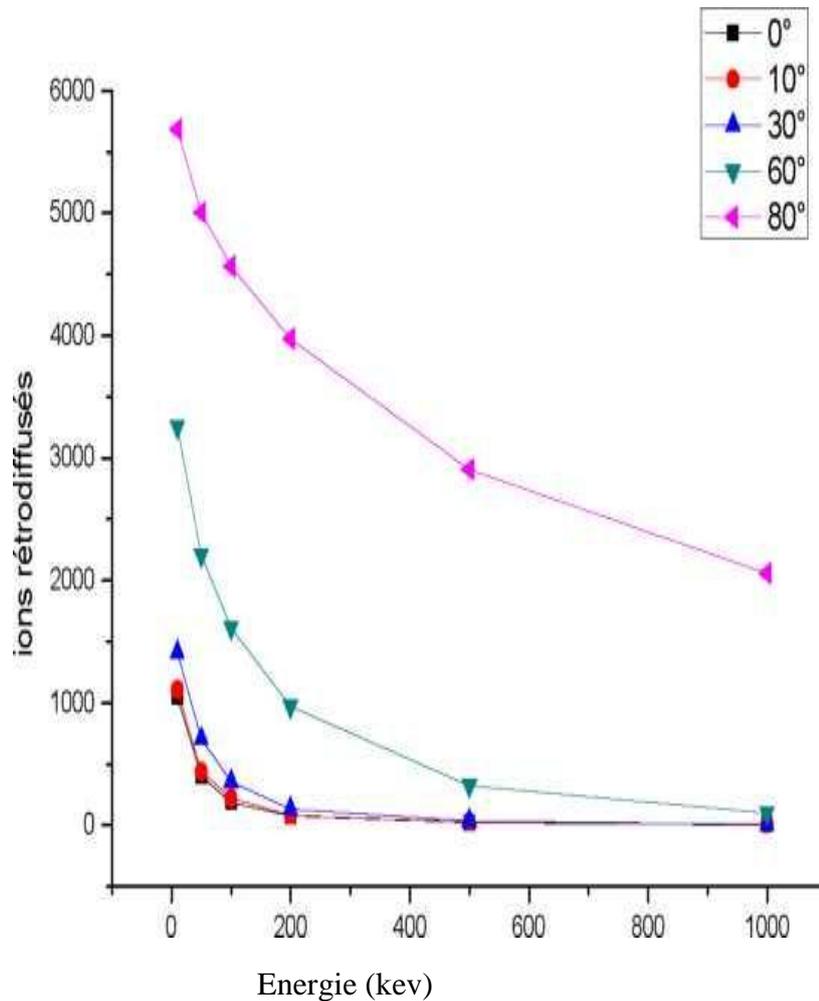
Le nombre d'ions transmis augmente en fonction de l'énergie, aucune transmission dans l'intervalle d'énergie [0- 500 KeV] quel que soit l'angle d'incidence parce que le phénomène de rétrodiffusion est dominant au-dessous de 500 Mev et la majorité des ions ne vont pas pénétrer dans le métal.

Le phénomène de transmission d'énergie nécessite une très grande énergie pour déplacer et pour faire des collisions avec les atomes de fer.

### III-5-2-7- L'étude de rétrodiffusion en fonction de l'énergie

Par l'étude de rétrodiffusion d'ions de bor avec les atomes de fer en fonction de leur

énergie et pour différents angles nous avons trouvé la figure suivante : Figure III.20



**Figure III. 20:** Ions rétrodiffusés en fonction de l'énergie pour différents angles d'incidence

Le graphe montre que le phénomène de rétrodiffusion dépend de la valeur de l'angle est fonction de l'énergie incidente.

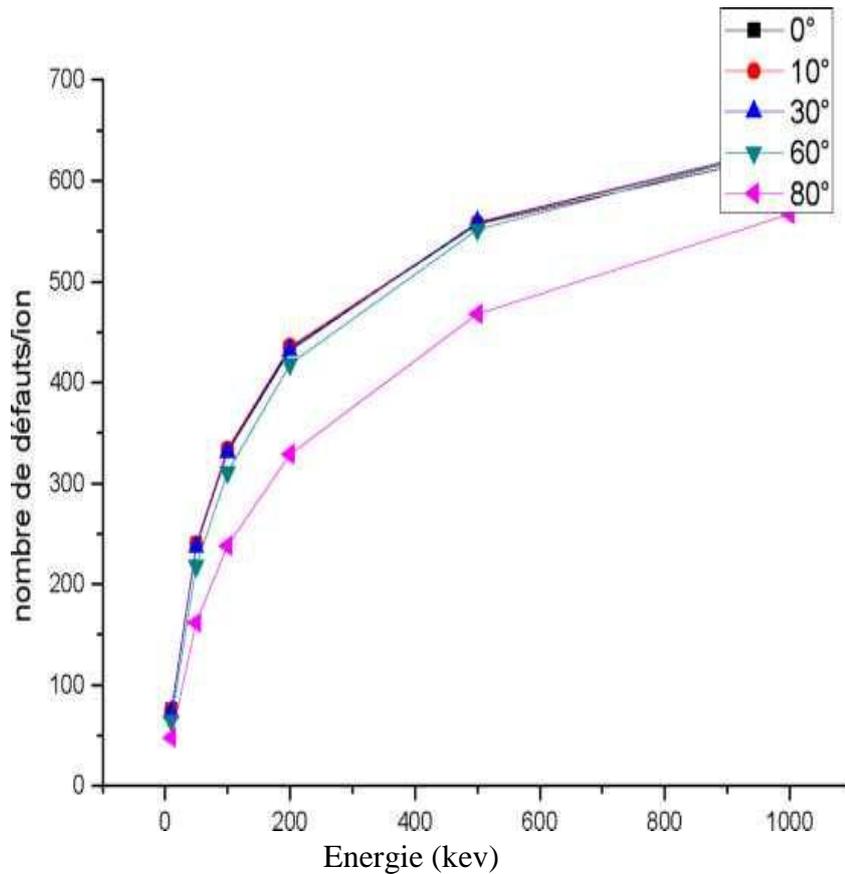
Quand l'énergie augmente, la diminution du taux d'ions rétrodiffusés s'explique par le nombre très important d'atome ionisé est, les collisions inélastiques deviennent prépondérantes.

Et quand l'angle diminue le phénomène de diffusion est dominant et il provoque la mobilité des espèces chimiques dans le matériau par des collisions élastiques.

### III-5-2-8- L'étude Nombre des défauts crée en fonction de l'énergie

Par l'étude du nombre des défauts en fonction de leur énergie et pour différents angles

nous avons trouvé la figure suivante Figure III.21



**Figure III.21:** Nombre de défauts créés en fonction de l'énergie pour différents angles

On s'aperçoit que l'allure des courbes est presque identique donc l'angle d'incidence n'influe pas sur le nombre de défauts sauf un écart pour l'angle  $80^0$  parce que la majorité d'ions vont rétrodiffuser Dou l'absence du grand nombre des défauts.

On peu constaté aussi que l'augmentation de l'énergie s'associer avec l'augmentation du nombre des défauts par la transmission de l'énergie entre l'ion et l'atome cible ce qui va créer des paires de frenkel et avec une grande mobilité.

### III-6-Conclusion

En conclu que seules les collisions nucléaires sont responsables de la création de défauts, soit à la suite des chocs primaires avec l'ion incident, soit à la suite des chocs secondaires avec un atome de la cible en mouvement issue d'un choc primaire ou secondaire.

Les défauts créés par l'implantation ionique sont des défauts ponctuels.

Les défauts majoritairement créés sont des paires de Frenkel (couple interstitiel+lacune).

De nombreuses paires de Frenkel sont immédiatement annihilées (interstitiel voisin d'une lacune), la structure cristallographique n'est pas totalement détruite.

Le nombre de défauts dépend de la vitesse de création des défauts (dose implantée, intensité du faisceau, profondeur de pénétration) et de la vitesse d'annihilation (donc de diffusion) des paires de Frenkel dans le matériau, les atomes de Bore de petite taille vont diffuser facilement dans le matériau.

## **III-7-comparaisons des résultats de simulation avec l'étude expérimentale**

### **III-7-1-Introduction**

L'implantation ionique est un procédé qui consiste à modifier la composition superficielle des matériaux en faisant pénétrer des ions possédant une énergie suffisante.

Elle fût utilisée depuis longtemps dans l'industrie électronique. L'idée est de Schockley [41] (un des inventeurs des transistors) qui proposa l'implantation ionique pour le dopage des semi-conducteurs dès 1951 [53].

Dans un premier temps les ions du matériau sélectionné bombardent et nettoient la surface à traiter puis, accélérés à plus haute tension, quelques centaines de keV, ils s'introduisent sur environ 1/2 micromètre dans l'épaisseur de la pièce dont ils modifient la composition chimique et les propriétés physiques [54], ce qui donne une bonne approximation pour notre étude.

Il n'y a pas d'échauffement notable de la surface traitée, qui ne se déforme pas et ne change pas de rugosité. Comme il n'y a pas d'interface, il n'y a pas non plus de problème d'adhérence sur le substrat mais la température limite d'utilisation des couches implantées ne dépasse pas 250-300 °C [55].

Il n'y a pas de pollution chimique et on note une plus grande diversité de matériaux déposables et de substrats possibles.

Cette opération consiste à introduire des atomes ionisés projectiles avec suffisamment d'énergie pour pénétrer dans l'échantillon cible (en général une plaquette).

Cette pénétration ne s'effectue que dans des régions de surface.

Cette opération est essentiellement utilisée pour doper le semiconducteur durant la fabrication des dispositifs [56].

Les atomes dopants sont en général: B, P, As, In, etc...

Les énergies des atomes ionisés peuvent être dans la gamme 3 keV à 500 keV, En fonction

de la nature du matériau implanté, de la nature de l'ion accéléré et de l'énergie d'accélération.

La profondeur moyenne de pénétration peut aller de  $100 \text{ \AA}$  à  $1 \mu\text{m}$ . En effet, un calcul approximatif montre qu'une centaine d'électron-volts est perdue par couche atomique (environ  $2,5 \text{ \AA}$ ).

Pour appliquer cette technique il faut utiliser un implantateur ionique et un microscope électronique de transmission comme la figure suivante.



(a)

(b)

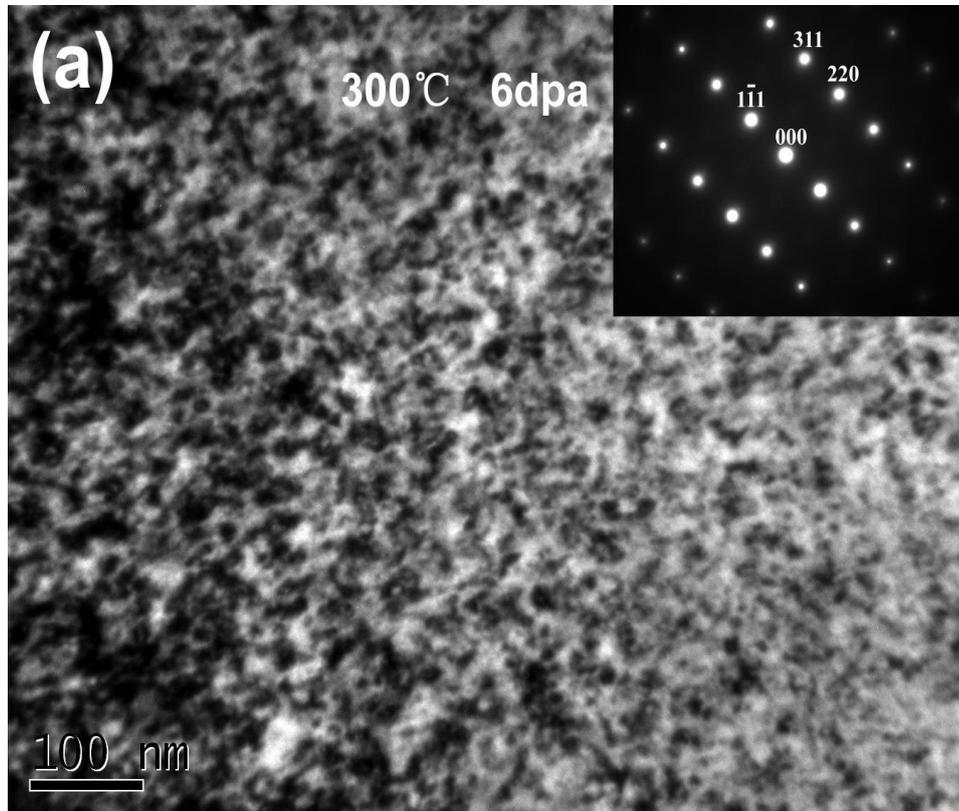
**Figure III-22** : Implantateur d'ions IRMA relié avec le MET pour des études d'irradiation in situ. (a) côté implantateur (b) côté MET [57].

Elle permet un contrôle précis de la quantité totale d'atomes implantés (dose d'implantation) et du profil de concentration du dopant. Cette précision permet en particulier l'ajustement de la valeur du gain en courant d'un transistor bipolaire ou l'ajustement de la tension de seuil d'un transistor MOS (choix de la nature d'un transistor - à enrichissement ou à appauvrissement). Notons que ce procédé s'effectue sous vide et donc en atmosphère sèche [58].

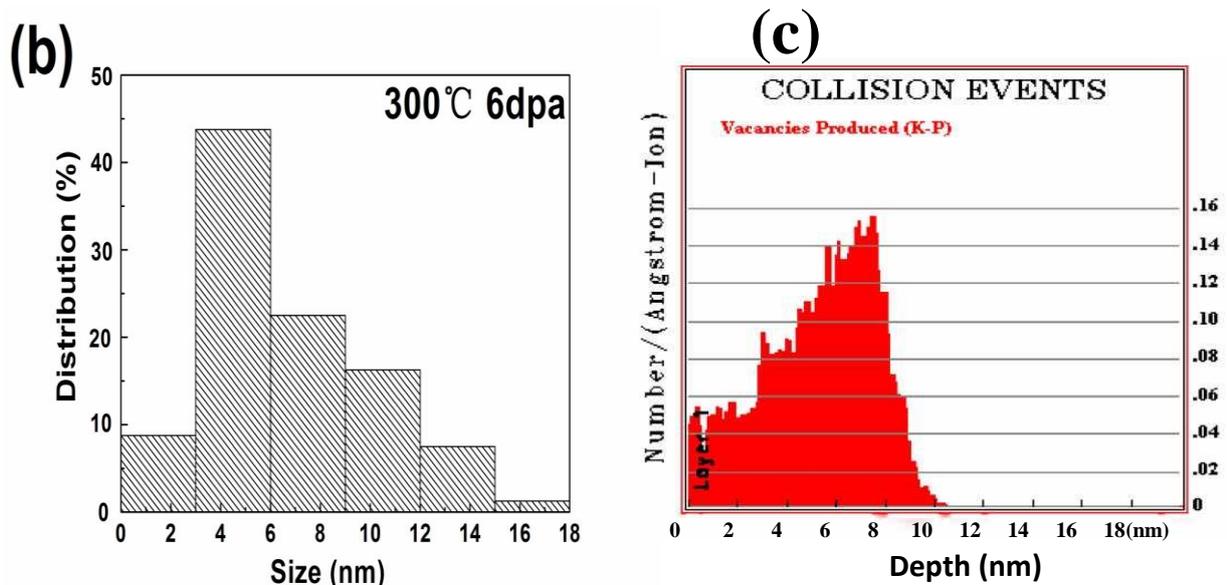
### III-7-2-comparaison

L'évolution de la microstructure du fer bombardé par des ions de bor a hautes températures avec énergie de  $600 \text{ keV}$  et un flux d'ions de  $2 \cdot 10^{15} / \text{cm}^2$  et a des températures de  $300^\circ \text{C}$  -  $550^\circ \text{C}$  ou nous avons prendre on considération que l'angle d'incidence des ions est de  $0^\circ$

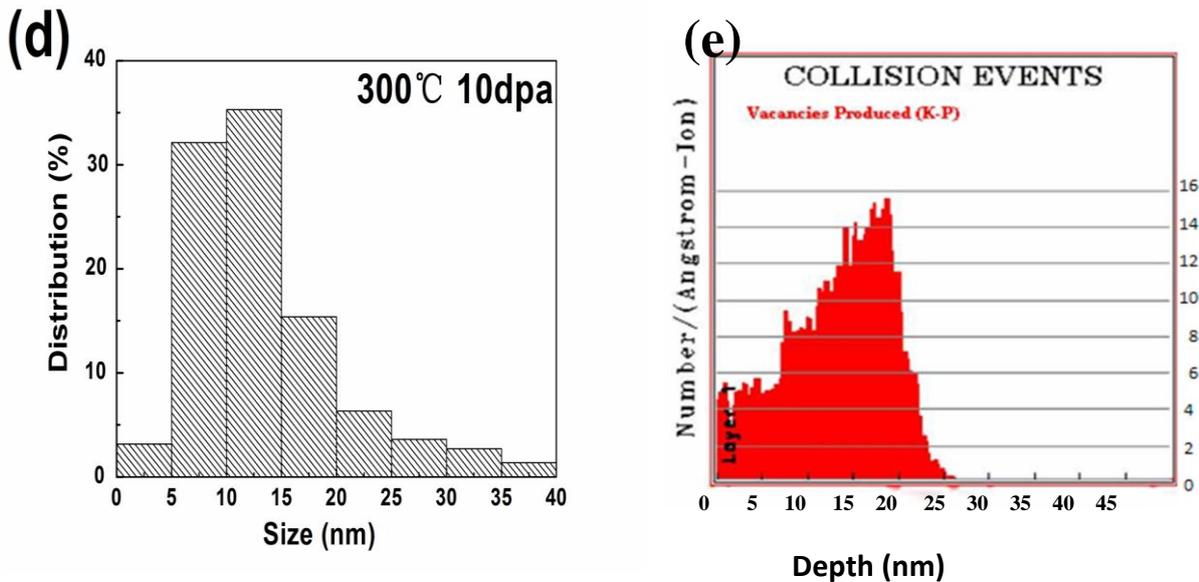
, tous cela donne un nombre de défaut varier de 6 dpa à 10 dpa comme on le vois dans les figures suivant apporté par un microscope électronique de transmission MET.



**Figure III-23-(a)** image par microscopie électronique d'une partie de la cible après l'irradiation à la température de  $300^{\circ}\text{C}$  [59].



**Figure III-24-** (b) la distribution de l'ion de bore dans la partie affronté du fer avec une angle d'incidence de  $0^{\circ}$  et une énergie de 120keV expérimentalement [60] (c) distribution du défaut pour même énergie et même angle par simulation.



**Figure III-25-** (d) la distribution des ions de bore dans la partie affrouté du fer avec la taille de profondeur avec une angle d'incidence de  $0^0$  et une énergie de 600keV expérimentalement [61] (e) distribution des défaut pour même énergie et même angle par simulation.

Nous avons conclu de ces comparaisons que les dommages d'irradiation dans le fer irradié par des ions de bore étudiés par la technologie de la microscopie électronique de transmission présente des dislocations pour l'irradiation d'énergie supérieure à 120keV et sa densité varie avec la profondeur de pénétration, ou on peut voir que la profondeur augmente avec l'énergie appliquée ou on peut arriver jusqu'à 10 dpa et avec une profondeur de 4 à 6(nm) pour l'énergie 120keV et de 10 à 15(nm) pour l'énergie 600keV par l'expérience, et un taux de défaut de 15dpa et une profondeur de 6 à 8(nm) pour l'énergie 120keV et de 15 à 20(nm) pour l'énergie 600keV par simulation sous une température de  $300^0$  C, ce qui donne une bonne approximation de notre étude.

# **Conclusion générale**

### **Conclusion générale**

Nous avons pu conclure que l'irradiation des métaux et alliages peut laisser des effets considérables sur les propriétés mécaniques et électriques comme l'élasticité, la dureté et la conductivité électriques.

Nous avons étudié comme exemple l'irradiation du Fer par des ions de Bor, cette opération s'appelle l'implantation ionique qui présente de nombreux avantages, c'est une méthode sélective, elle nous a permis d'établir le lien entre épaisseur désirée et l'énergie correspondante et l'angle d'incidence, Cette épaisseur dépendant du domaine d'application allant du nanomètre au micromètre.

Par l'utilisation du logiciel SRIM nous avons pu constater que la profondeur de pénétration des ions de Bor dans le Fer est proportionnel avec l'énergie des ions de Bor, et inversement proportionnel avec leurs angles d'incidences, ou en peut arriver à une profondeur de 500nm par un flux d'énergie 600keV et avec un angle d'incidence  $0^{\circ}$ .

La dose relative de Bore dans le Fer dans cette région implantée à une profondeur est facile à calculer à partir de la dose totale des ions incidents, et de l'épaisseur de la couche implantée. cette valeur peut dépasser les limites de solubilité du Bore dans le Fer car l'implantation n'est pas un processus thermique, nous assistons donc à la synthèse des composés amorphes apparus dès 1960, notre étude laisse apercevoir de nouveaux composés de types  $Fe_{(1-x)} B_x$ .

La microscopie électronique à transmission (MET) nous permet d'obtenir les mêmes résultats expérimentalement et peut encore donner les informations suivantes :

- Identification des défauts
- Détermination de la nature des amas (lacunes ou interstices)
- mesure de la taille des amas
- détermination de leur densité

# Bibliographie

- [1]P.pavlov, A.khokilov, physique du solide (1989)
- [2] <http://fr.wikipedia.org/wikivalence>.
- [3]Neil W.ashcroft et N.David Mermin, physique des solides (1976).
- [4] matériaux pour le nucléaire, académie des science paris (2000).
- [5]K.J.Leonard, fundamentals of radiation damage gournal materials (1994)
- [6]GUY a.g.hren.effects of radiation on materials (2005)
- [7]C. Lemaignan, matériaux pour le nucléaire, technique de l'ingénieur (2012).
- [8]J. M. Gras, matériaux du nucléaire, technique de l'ingénieur (2012).
- [9]C.Lemaignan, materiaux de nucleaire academie des sciences en France (2000)
- [10]Berge P Zacharie G endommagement des matériaux dans les centrales nucléaires (1997)
- [11]M. Li, S.J. Zinkle , Physical and Mechanical Properties of Copper and Copper Alloys
- [12]P.Rodriguez, Nuclear Reactor Materials Irradiation Effects Encyclopedia of Materials: Science and Technology (Second Edition), (2001).
- [13]G. Jian, Microstructure evolution in proton-irradiated austenitic Fe-Cr-Ni alloys under LWR core conditions(1999).
- [14]M. Nastar, diffusion and compled fluxes in cocentrated alloys under irradiation (2008).
- [15]H. R. Bragger, effects of neutron irradiation (1985).
- [16]G. Pippin, space environments and induced dammage mechanismes (2001).
- [17]A.Dunlop, material under irradiation (1993)
- [18]S.A. fabristiev, effect of high doses of neutron irradiation on phsico-mechanical properties of copper alloys for ITER applications (2004).
- [19]J.H.Zuo, Z.G.Wang, the effect of ion irradiation of the tensile and fatigue properties of TI-6AL-4V alloy (2010).
- [20]M.Sandra, effets d'irradiation dans les matériaux pour la transmutation des actinides (2009).
- [21] les techniques de l'ingéneure . Volumes métallurgies et génie nucléaire(2001)
- [22]Baillyh,Menessied. Prunier le combustible nucléaire des réacteurs a eau (1996)
- [23]Lemaignan.c, la rupture des matériaux (2003)
- [24]Benard J métallurgie générale (masson . paris)p312(1984)
- [25]F. Onimus, J.L. Béchade , Radiation Effects in Zirconium Alloys Comprehensive Nuclear Materials, Volume 4, (2012).
- [26]R.M. Boothby, Radiation Effects in Nickel-Based AlloysComprehensive Nuclear

Materials, Volume 4, (2012).

[27]M.L. Grossbeck, Effect of Radiation on Strength and Ductility of Metals and Alloys(2012).

[28]B. Todd, Isolation of the role of radiation-induced segregation in irradiation-assisted stress corrosion cracking of proton-irradiated austenitic stainless steels (2001).

[29]A.Frely, effets d'irradiation sur l'états d'ordre chimique dans les alliages(Ni-Cr)<sub>1-x</sub> fe<sub>x</sub> Journle de physique (1996).

[30]J.H.Zuo, Z.G.Wang, the effect of ion irradiation on the tensile on fatigue properties (2010).

[31]Frostv.c.h material science and technology ,vol.10: nuclear material (1994) .

[32]G. Florent, thèse de doctorat, Fabrication des couches minces a mémoire de forme et effets de l'irradiation ionique, Université Laval (Canada)(1998).

[33]G. Michael, Effects of implanted solutes and heavy-ion cascades on the kinetics of radiation-induced segregation in binary alloys (1999).

[34]<http://www.research.ibm.com/ionbeams/home.htm#srim>.

[35]Barkas H., Academic Press, New-York, chapter 9, 1 (1963)

[36]Lindhard J., Scharff M. and Shiott H. E., Mat. Phys. Medd., Range concepts and heavy ion ranges (1963).

[37]Kalbitzer S., Oetzman H., Grahmann H., Feuerstein A., Z. Phys., A 278 , 3,223, A simple universal fit formula to experimental nuclear stopping power data (1976).

[38]Favennec P., « L'implantation ionique pour la microélectronique et l'optique », Ed Masson, (1993).

[39]Ziegler J. F., Biersack J. P., Stopping and Range of Ions in Matter, SRIM (2003)

[40]R. F. Tylecote, History of Metallurgy (Institute of Materials, London 1992).

[41]See W. H. Dennis, Metallurgy of the Ferrous Metals and Foundations of Iron and Steel Metallurgy (1967).

[42]Harry B, les électrons et la liaison chimiques, Gray Clumbia university(1997).

[43]Day and R. F. Tylecote, the Industrial Revolution in Metals, Institute of Materials (1991).

[44]H.Ryssel, G.Prinke, K.Haberger, K.Hoffmann, K.Müller, and R. Henkelmann, Range Parameters of Boron Implanted into Silicon Appl. Phys.A, vol. 24, pp. 39-43, (1981).

[45]G. B. Grad, P. Blaha, K. Schwarz, W. Auwarter, T. Greber, Phys. Rev. B 68, 085404 (2003).

[46]Clarke, H. T.; Dreger, E. E. Organic Syntheses Vol.1 (1941).

- [47]H. R. Schubert, History of the British Iron and Steel Industry ... to 1775 AD (Routledge, London, 1957).
- [48]Dauphas, N. & Rouxel, O. Mass spectrometry and natural variations of iron isotopes. Mass Spectrometry Reviews, 25, 515 (2006).
- [49]J. J. Pouch, S. A. Alterovitz, Synthesis and Properties of Boron Nitride (Trans Tech Publications, Limited, 1990).
- [50]L. Pauling and R. Hayward, The Architecture of Molecules (San Francisco: W. H. Freeman, (1964).
- [51]Geology of the Industrial Rocks and Minerals (New York: Dover, 1969).
- [52]T. Wartik, ed., From Borax to Boranes (Washington, DC: American Chemical Society), (1961).
- [53]Applications industrielles des composés du bore, Informations Chimie, n°178, in (1978).
- [54]Information du Borax Français, BP 59, 59411 Coudekerque-Branche Cedex.
- [55]A. Ludovic, thèse de doctorat {élaboration de revêtements sur acier inoxydable, simulation de la fusion par irradiation laser, caractérisation structurale, mécanique et tribologique}, (2003).
- [56]D. Cooper, la classification périodiques des élément chimiques (dunod paris 1967).
- [57] Paul Pascal, A. Chrétien, Y. Trambouze, W. Frenlich, nouveau traité de chimie minérale, (tome 1) paris (1998).
- [58]David J. Joyner, Oliver Johnson, and David M. Hercules, a Study of the Iron Borides. Electron Spectroscopy (1980).
- [59]B. Mebarek, S. Bouaziz et A. Zanoun, simulation numérique de la cinétique de boruration thermochimique d'un acier C3, thèse de doctorat soutenue en (2004)
- [60] Jin SX, Guo LP, Yang Z, Fu DJ, Liu CS, Tang R, et al. Microstructural evolution of ferritic/martensitic steel under argon ion irradiation. Mater Charact.
- [61] Jin SX, Guo LP, Yang Z, Fu DJ, Liu CS, Xiao W, et al. Microstructural evolution in nickel alloy C-276 after Ar<sup>+</sup> ion irradiation. Nucl Instrum Meth Phys Res.
- [62] Rowcliffe AF, Mansur LK, Hoelzer DT, Nanstad RK. Perspectives on radiation effects in nickel-base alloys for applications in advanced reactors. J Nucl Mater

## Résumé :

Notre travail se base sur l'endommagement des métaux et alliages sous l'effet d'irradiation électronique, neutronique et ionique.

Nous avons commencé par des rappels atomistiques et les constructions cristallines des matériaux métalliques, puis nous avons donné un aperçu générale sur les défauts de structures ponctuels, linéaires et volumiques.

Puis nous avons abordé les interactions particules-matières et leurs défauts correspondants, suivant l'énergie et le flux d'irradiation, et une application sur les cuves nucléaire en aciers figuré dans une partie du document.

Et finalement nous avons utilisé une simulation sur le procédé d'implantation ionique présentant de nombreux avantages : c'est une méthode sélective, elle nous a permis d'établir le lien entre, épaisseur désirée et l'énergie correspondante.

**Mots clés :** irradiation-dislocation-défauts-ionisation-diffusion-cible-cavité.

## ملخص

يعتمد عملنا هذا على دراسة التشوهات الحادثة في المعادن والسبائك تحت تأثير الإشعاعات الإلكترونية والنيوترونية والايونية.

بدانا بالتذكير بالمفاهيم الأساسية للبنية البلورية للمواد المعدنية ثم تطرقنا الى التشوهات النقطية والخطية والحجمية. بعد ذلك عرضنا التأثيرات المتبادلة بين الجسيمات والمواد والتشوهات الموافقة حسب طاقة وتدفق الإشعاع مع اضافة بعض التطبيقات على الاحواض داخل المفاعلات النووية. واخيرا اجرينا مقارنة على طريقة زرع الايونات ومن بين النتائج المتحصل عليها العلاقة بين السمك المطلوب والطاقة الموافقة.

**الكلمات المفتاحية:** اشعاع-انزياح-تشوه-تاين-انتشار.