

Soutenance de thèse Mohamed EL BAKOURI

Approche in silico pour modéliser et caractériser les changements microstructuraux induits par irradiation dans les matériaux - Application au fer et au nickel

Résumé :

La recherche fondamentale et les applications techniques mettant en jeu des faisceaux d'ions couvrent des domaines variés tels que les dispositifs électro-optiques avancés, la nanostructuration, l'ingénierie de la déformation cristalline, les matériaux pour l'énergie nucléaire et l'exploration spatiale. Les faisceaux d'ions sont ainsi utilisés pour synthétiser, façonner, tester ou modifier les propriétés des matériaux. Dans la plupart des cas, les objectifs souhaités sont rendus possibles par le transfert d'énergie des particules énergétiques vers les noyaux atomiques et/ou les électrons de la cible, mais le dépôt d'énergie conduit généralement à la génération de défauts et à l'accumulation de dommage indésirable. Par conséquent, comprendre les mécanismes de formation et d'évolution des défauts dans les matériaux apparaît comme une problématique importante à traiter.

L'accumulation de dommage dans les matériaux irradiés est couramment étudiée à travers une analyse phénoménologique de paramètres tels que la déformation élastique ou la fraction de désordre qui peuvent être obtenus via des techniques de caractérisation expérimentale, à savoir la spectrométrie de rétrodiffusion Rutherford en mode canalisation (RBS/C) et la Diffraction des rayons X (DRX). Bien que ces paramètres contiennent des informations sur les déplacements atomiques dans le réseau cristallin des matériaux, établir un lien avec la structure et la densité réelles des défauts n'est pas trivial, pas plus que ne l'est la comparaison quantitative avec une modélisation des effets d'irradiation. Pour cela, il est nécessaire à la fois de développer des outils ad hoc pour calculer des signaux (pseudo-expérimentaux) à partir des données de modélisation, et de déterminer les caractéristiques intrinsèques, ou telles que vues par ces techniques, de défauts cristallins typiques.

Dans cette thèse, nous considérons ces deux aspects, en prenant le fer (Fe) et le nickel (Ni) comme cas d'étude. Premièrement, nous proposons une méthodologie entièrement basée sur de la modélisation pour produire des cristaux numériques modèles contenant un seul type de défaut, de densité ou de taille variable, qui sont utilisés pour déterminer, à partir de signaux simulés de RBS/C et DRX, des informations de base sur ces défauts telles que leur volume de relaxation et leur capacité à induire du désordre. Ces deux grandeurs calculées peuvent également être utilisées pour interpréter la déformation élastique ou la fraction de désordre déduites d'expériences de RBS/C ou de DRX, exploiter des données de modélisation ou alimenter des codes de calcul multi-échelles simulant des dommages induits sous irradiation. Deuxièmement, nous avons généré des signaux RBS/C et DRX à partir de données à l'échelle atomique obtenues par une technique de dynamique moléculaire (DM) permettant de simuler un temps d'irradiation prolongé, afin d'en tirer des cinétiques de désordre et de déformation ; nous montrons qu'il est possible de définir différentes étapes dans les changements microstructuraux, chacune étant attribuable à des structures de défauts bien identifiées car connues grâce à l'analyse des données de DM. Ces informations issues de la modélisation peuvent ensuite être utilisées pour interpréter les cinétiques expérimentales d'endommagement.