

## **FRAGILISATION DES GAINAGES NUCLEAIRES PAR LES HYDRURES A LA LUMIERE DES LIAISONS FORTES**

*P. Eyméoud<sup>1</sup>, A. Charaf Eddir<sup>2</sup>, F. Ribeiro<sup>1</sup>, G. Tréglia<sup>2</sup>*

*1 Institut de Radioprotection et de Sûreté Nucléaire, IRSN, Bat. 702, C.E. Cadarache, BP3-13115 Saint Paul-Lez-Durance Cedex, France*

*2 Centre Interdisciplinaire de Nanosciences de Marseille, CINaM, CNRS - Aix-Marseille Université, Campus de Luminy, Case 913, F13288 Marseille Cedex 9, France*

Dans le cœur d'un réacteur à eau pressurisé, les gaines des crayons combustibles constituées d'alliage de zirconium sont oxydées par l'eau du circuit primaire, conduisant à la libération d'hydrogène. Une partie de cet hydrogène est absorbé au cœur de l'alliage. Positionnés dans les sites interstitiels de la matrice de Zr, les atomes d'hydrogène sont initialement en solution solide. Lorsque leur concentration atteint la limite de solubilité, ils forment des précipités d'hydrures au sein du réseau. Ces hydrures fragilisent le matériau en abaissant sa ductilité et sa limite de rupture. Ils peuvent également être le lieu d'amorçage de fissures. Ceci constitue un enjeu de sûreté nucléaire, car l'intégrité de la gaine, première barrière de sûreté confinant la matière radioactive, doit être assurée durant toute la durée de vie des crayons combustibles.

Pour répondre à cet enjeu, Il est donc fondamental de bien comprendre les mécanismes régissant les précipitations et la dissolution des hydrures de zirconium sur une gamme étendue de temps, de température et de contraintes mécaniques.

Bien que de nombreuses investigations expérimentales et théoriques aient été menées depuis plusieurs décennies, nombreuses sont les contradictions et incertitudes quant à la nature, la stabilité et les cinétiques de transformation de ces hydrures. L'objectif de notre étude est de clarifier le diagramme de phase des hydrures de zirconium, puis d'étudier la cinétique des transitions de phase, en particulier le phénomène de dissolution/remise en solution, et enfin de comprendre et de quantifier le lien entre précipité d'hydrures et contraintes locales dans le métal. Un tel travail nécessite la mise en œuvre de simulations thermostatiques de type Monte Carlo fondées sur des potentiels interatomiques fiables. Dans ce cas les modèles de type « Ising effectif » ou développement d'amas sont très généralement utilisés mais ne sont pas *a priori* adaptés pour décrire la cohésion du système Zr-H. Grâce au formalisme des liaisons fortes, on peut démontrer par une approche perturbative que, comme dans le cas des alliages ou des carbures, de telles approches sont bien justifiées pour décrire les effets couplés d'ordre chimique et de contraintes sur un réseau rigide dans les hydrures. A partir des termes effectifs obtenus, il devient ainsi possible de déterminer les stabilités relatives des différentes phases en présence et de les classer sur des cartes structurales.