



HAL
open science

Modélisation de la croissance sous irradiation de feuilards de zircaloy-4 détendus en fonction de leur texture

Nour-Eddine Khelifi

► **To cite this version:**

Nour-Eddine Khelifi. Modélisation de la croissance sous irradiation de feuilards de zircaloy-4 détendus en fonction de leur texture. Chimie. Université Paul Verlaine - Metz, 1991. Français. NNT : 1991METZ024S . tel-01775949

HAL Id: tel-01775949

<https://hal.univ-lorraine.fr/tel-01775949>

Submitted on 24 Apr 2018

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.



AVERTISSEMENT

Ce document est le fruit d'un long travail approuvé par le jury de soutenance et mis à disposition de l'ensemble de la communauté universitaire élargie.

Il est soumis à la propriété intellectuelle de l'auteur. Ceci implique une obligation de citation et de référencement lors de l'utilisation de ce document.

D'autre part, toute contrefaçon, plagiat, reproduction illicite encourt une poursuite pénale.

Contact : ddoc-theses-contact@univ-lorraine.fr

LIENS

Code de la Propriété Intellectuelle. articles L 122. 4

Code de la Propriété Intellectuelle. articles L 335.2- L 335.10

http://www.cfcopies.com/V2/leg/leg_droi.php

<http://www.culture.gouv.fr/culture/infos-pratiques/droits/protection.htm>

18 78523

MODELISATION DE LA CROISSANCE
SOUS IRRADIATION DE FEUILLARDS DE ZIRCALOY-4
DETENDUS EN FONCTION DE LEUR TEXTURE

par

KHELIFI Nour-eddine

Thèse

Soutenue le 4 juillet 1991

à l'UFR MIM-Sciences de l'Université de Metz

en vue de l'obtention du grade de docteur d'Université

en Génie Physique et Mécanique.

BIBLIOTHEQUE UNIVERSITAIRE - METZ	
N° inv.	1991 0505
Cote	S/M ₃ 91/24
Loc	Magasin

JURY

M. HUMBERT : **Directeur de thèse**
M. ARMINJON : **Rapporteur**
C. ESLING : **Rapporteur**
M.J. PHILIPPE : **Examineur**
J. BARD : **Examineur**

TABLE DES MATIERES

INTRODUCTION GENERALE

CHAPITRE I : RAPPEL BIBLIOGRAPHIQUE SUR LA CROISSANCE SOUS IRRADIATION

- 1-1 Introduction
- 1-2 Comportement des matériaux sous irradiation
- 1-3 Lois de croissance
- 1-4 Effet des impuretés sur la croissance sous irradiation
- 1-5 Conclusion

CHAPITRE II : ANALYSE TRIDIMENSIONNELLE DES TEXTURES

- 2-1 Introduction
- 2-2 Orientation et symétries
- 2-3 Fonction de texture
- 2-4 Densité de pôles - Figures de pôles
- 2-5 Fonction de distribution biaxiale
- 2-6 Effet des symétries sur le calcul de la F.D.O. et $P_h(y)$
- 2-7 Conception des programmes
- 2-8 Détermination des figures de pôles
- 2-9 Conclusion

CHAPITRE III : ETUDE DE MODELISATION DE LA CROISSANCE SOUS IRRADIATION DE FEUILLARDS ZIRCALOY-4 DETENDUS EN FONCTION DE LEUR TEXTURE

- 3-1 Introduction
- 3-2 Principe de calcul des grandeurs physiques moyennes
- 3-3 La croissance sous irradiation
- 3-4 Adaptation aux calculs de variations dimensionnelles de tubes
- 3-5 Coefficients de Kearns
- 3-6 Variations volumiques
- 3-7 Signification géométrique des déformations principales
- 3-8 Coefficient de croissance
- 3-9 Détermination des déformations ϵ_c et ϵ_a du monocristal.
- 3-10 Détermination des déformations monocristallines dans le cas de conservation de volume
- 3-11 Conclusion

CHAPITRE IV : RESULTATS EXPERIMENTAUX

- 4-1 Introduction
- 4-2 Analyse des textures
- 4-3 Détermination de la fonction de texture
- 4-4 Résultats
- 4-5 Calcul des coefficients de Kearns
- 4-6 Calcul des déformations
- 4-7 Coefficient de croissance
- 4-8 Calcul des extrema de la déformation macroscopique
- 4-9 Variation de la déformation volumique en fonction de la fluence
- 4-10 Conclusion.

CHAPITRE V ESTIMATION DES ERREURS

- 5-1 Introduction
- 5-2 Estimation des erreurs sur les coefficients de texture
 C_2^{00} et C_2^{02}
- 5-3 Estimation des erreurs sur les coefficients de Kearns
- 5-4 Estimation des erreurs sur les déformations macroscopiques moyennes
- 5-5 Discussion sur les hypothèses de la conservation de volume
- 5-6 Estimation des erreurs sur les déformations microscopiques moyennes
- 5-7 Détermination du comportement du monocristal et de sa précision dans le cas des valeurs maximales de E_L et E_T
- 5-8 Conclusion

CONCLUSION GENERALE

- ANNEXE I : Calcul de la fonction de distribution axiale $A(h,y)$ en fonction des coefficients de texture C_l^{mn}
- ANNEXE II : Calcul des fonctions : $K_0^0(y)$, $K_2^0(y)$, $K_2^2(y)$.
- ANNEXE III : Détermination de la croissance moyenne d'un polycristal

INTRODUCTION GENERALE

Dans les réacteurs nucléaires refroidis à l'eau (lourde ou ordinaire), on emploie les alliages de zirconium en raison de leur bonne tenue à la corrosion à l'eau et de leur faible section de capture des neutrons thermiques.

Ces alliages, utilisés dans le coeur, c'est-à-dire la zone la plus chaude du réacteur, en tant que gaines ayant pour rôle d'isoler le combustible du fluide caloporteur et d'assurer l'évacuation de l'énergie thermique produite par la fission vers le fluide caloporteur, sont soumis à une irradiation neutronique de haut flux.

Il en résulte alors d'importantes modifications dimensionnelles du matériau polycristallin en l'absence de contraintes appliquées. Ce phénomène appelé la croissance sous irradiation, dépend de la fluence, de la température et dans la plupart des cas d'autres paramètres.

En plus de la croissance, le bombardement de neutrons en déplaçant les atomes de la gaine, modifie la plupart de ses propriétés. De nombreuses recherches ont été entreprises afin d'améliorer les produits en vue de minimiser la croissance. Cependant, de nombreux problèmes méritent encore d'être approfondis ; on peut citer :

- La recherche de la texture (caractéristique importante du milieu polycristallin) la plus favorable aux comportements mécaniques et physiques des matériaux utilisés.

- L'étude de l'évolution de la microstructure (défauts ponctuels et linéaires, etc...) ;

- Le choix des composants chimiques additionnels et de leurs teneurs améliorant les propriétés du matériau et limitant la croissance.

En effet, la croissance sous irradiation est un phénomène fort complexe, que l'on ne peut déterminer que si l'on connaît bien, non seulement la fluence et la texture cristallographique (i.e. la répartition de l'orientation des grains), mais aussi :

- la température d'utilisation,
- l'état métallurgique du matériau,
- le degré d'écrouissage préalable du matériau,
- la microstructure,
- l'hétérogénéité chimique,
- tailles et formes des grains.

La détermination de la croissance sous irradiation peut s'appuyer soit sur des mesures d'irradiation réalisées en piles, soit sur des modèles prédictifs qui prennent en compte les caractéristiques mécaniques et structurales (notamment la texture) des produits.

Or, il est bien connu que les expériences d'irradiation en piles sont coûteuses et longues au point de n'apporter de réponse qu'au terme de plusieurs années.

Il est donc nécessaire de développer des modèles de calcul prédictifs fiables. La réalisation de tels modèles est une tâche ambitieuse.

On peut dans une première approche se limiter uniquement à la prise en compte d'un seul paramètre (structural ou mécanique etc...), tout en supposant que les autres paramètres sont constants.

La Société FRAMATOME, utilisatrice de matériaux destinés à une utilisation nucléaire, désireuse d'améliorer les critères de choix de ces matériaux vis à vis de la croissance sous irradiation a été le promoteur de ce travail qui a pour objet l'élaboration d'un modèle prédictif de croissance sous irradiation en fonction de la texture ainsi que sa critique.

Dans le modèle que nous avons développé, on suppose que le comportement macroscopique correspond au comportement microscopique pondéré par la fonction de densité des orientations qui décrit la proportion volumique de cristallites dans un intervalle d'orientation déterminé.

Il est à rappeler que cette hypothèse simplificatrice (prise en compte uniquement de la texture cristallographique) a été utilisée avec succès dans le cas de la modélisation de l'anisotropie élastique, de l'anisotropie magnétique et de la dilatation thermique.

Dans une seconde étape, le modèle que nous avons développé est utilisé pour déterminer les variations dimensionnelles attribuées au monocristal à partir des variations dimensionnelles d'un échantillon polycristallin de Zircaloy-4 irradié, dont la texture est connue.

Cette façon de procéder permet d'attribuer au monocristal un comportement qui prend en compte les autres paramètres et les interactions entre grains.

Les résultats précédents nous permettent de prédire dans une dernière étape la croissance sous irradiation de certains échantillons polycristallins de Zircaloy-4, de texture connue, qui ont subi des traitements thermomécaniques et un processus de mise en forme comparables à ceux de l'échantillon qui a servi aux mesures de l'irradiation.

Les résultats de ces mêmes échantillons irradiés nous seront transmis en 1993 afin qu'on les compare avec les résultats prédits.

CHAPITRE I

RAPPEL BIBLIOGRAPHIQUE SUR LA CROISSANCE SOUS IRRADIATION

- 1-1 INTRODUCTION
- 1-2 COMPORTEMENT DES MATERIAUX SOUS IRRADIATION
 - 1-2-a Classement des différents défauts créés par irradiation
 - 1-2-b Phénomènes liés aux défauts ponctuels d'irradiation.
 - 1- Le gonflement
 - a) Le gonflement par cavités, à moyenne température.
 - b) Le gonflement par gaz, à haute température.
 - 2- La croissance.
 - 3- Autres effets.
 - 1-2-c Comportement du Zirconium et de ses alliages sous irradiation.
- 1-3 LOIS DE CROISSANCE
 - 1-3-a Généralités
 - 1-3-b Croissance et texture.
 - 1-3-c Fluage d'irradiation et croissance.
 - 1-3-d Effet de l'écrouissage
 - 1-3-e Croissance et densité de dislocations
 - 1-3-f Effet de taille de grains
- 1-4 EFFET DES IMPURETES SUR LA CROISSANCE SOUS IRRADIATION
 - 1-4-a Effet de l'oxygène
 - 1-4-b Effet du niobium
 - 1-4-c Effet de l'étain
- 1-5 CONCLUSION

1-1 INTRODUCTION - [1-4]

Le zirconium est utilisé presque uniquement dans l'industrie nucléaire en raison de deux propriétés :

- sa très faible section de capture des neutrons thermiques : 0,18 barns (alors que celle de l'acier inoxydable est voisine de 2,9 barns)

- sa très bonne tenue à la corrosion à chaud aussi bien dans l'eau bouillante que pressurisée.

Ces caractéristiques, liées à des propriétés mécaniques assez bonnes (néanmoins très variables selon le procédé d'élaboration et la teneur en impuretés, notamment en oxygène et en azote) en font un matériau de choix pour le gainage des éléments combustibles. De plus, c'est un métal relativement léger : densité $6,5 \text{ g/cm}^3$ à 20°C .

Les études menées pour l'amélioration des propriétés mécaniques et la conservation des propriétés "nucléaires", ont conduit à l'élaboration de différents alliages de zirconium notamment des zircalloys.

Le développement de l'emploi des alliages de zirconium pour le gainage des éléments combustibles des réacteurs de puissance refroidis et modérés par l'eau résulte de l'échec de l'utilisation des gaines en acier.

La fonction essentielle de la gaine est double :

- assurer l'étanchéité dans toutes les circonstances normales de fonctionnement, en isolant le combustible du fluide caloporteur afin de protéger le combustible contre l'action corrosive du caloporteur et en empêchant la contamination du caloporteur par les produits de fission qui s'échappent du combustible ;

- assurer la transmission de chaleur au caloporteur.

Les deux principaux alliages de zirconium utilisés pour le gainage sont le zircaloy 2 et le zircaloy 4 (tableau I). Ce dernier tend progressivement à remplacer le zircaloy 2, car on pense qu'il absorbe un peu moins l'hydrogène.

Les alliages de zirconium sont utilisés dans les réacteurs à eau bouillante ou pressurisée de type américain et dans les réacteurs à eau lourde de type canadien et anglais. Les éléments combustibles des réacteurs à eau, développés en U.R.S.S., sont gainés principalement par un alliage de zirconium à 1% de niobium. Cet alliage est plus résistant au fluage et il absorbe un peu moins l'hydrogène que le zircaloy 4. Signalons enfin que les éléments combustibles du réacteur prototype Français EL4 modéré à l'eau lourde et refroidi par du CO_2 sont gainés par un alliage de zirconium et de cuivre (1,8 ou 2,5% Cu).

Sn	Fe	Cr	Ni	O ₂	C	Zr
1,2 à 1,7	0,18 à 0,24	0,07 à 0,13	0,007 (tracc)	0,08 à 0,15	0,0015 à 0,003	reste

Tableau (1-1) : Composition chimique du Zircaloy-4 en %.

1-2 Comportement des matériaux sous-irradiation.

1-2-a Classement des différents défauts créés par irradiation. [5-9]

En irradiant un métal, on cède localement de l'énergie aux atomes. S'il reçoit une énergie suffisante E_s (dite énergie de seuil), un atome est chassé du site S_0 qu'il occupait initialement. Il se relogé généralement en position interstitielle, laissant en S_0 une lacune. Le couple lacune-interstitiel créé par l'irradiation est appelé paire de Frenkel.

Scitz [10] a montré que pour la plupart des métaux E_s est de l'ordre de 25 eV. Chaque fois qu'un atome reçoit une énergie inférieure à E_s , il s'éloigne de sa position d'équilibre mais, incapable de se frayer un passage entre ses voisins, il revient à sa position initiale en dissipant son énergie en vibrations thermiques. La majeure partie de cette énergie est dissipée en agitation thermique. C'est elle qui passe dans le fluide caloporteur puis dans les turbines. Si le neutron incident est très énergétique, l'atome frappé peut acquérir une énergie suffisante non seulement pour être éjecté, mais encore chasser à son tour d'autres atomes et ainsi de suite jusqu'à ce que l'énergie devienne inférieure à E_s . On dit que l'on a affaire à un effet de cascade dont le premier atome est un primaire (fig.1-1). On montre [11] que pour un primaire d'énergie E le nombre n_{pF} de paires de Frenkel créées lorsque tous les atomes sont revenus au repos est :

$$n_{pF} \approx 0,5 \frac{E}{E_s} \quad (1-1)$$

L'ensemble des défauts créés par irradiation et leurs conséquences pratiques sont représentés dans le tableau (1-2).

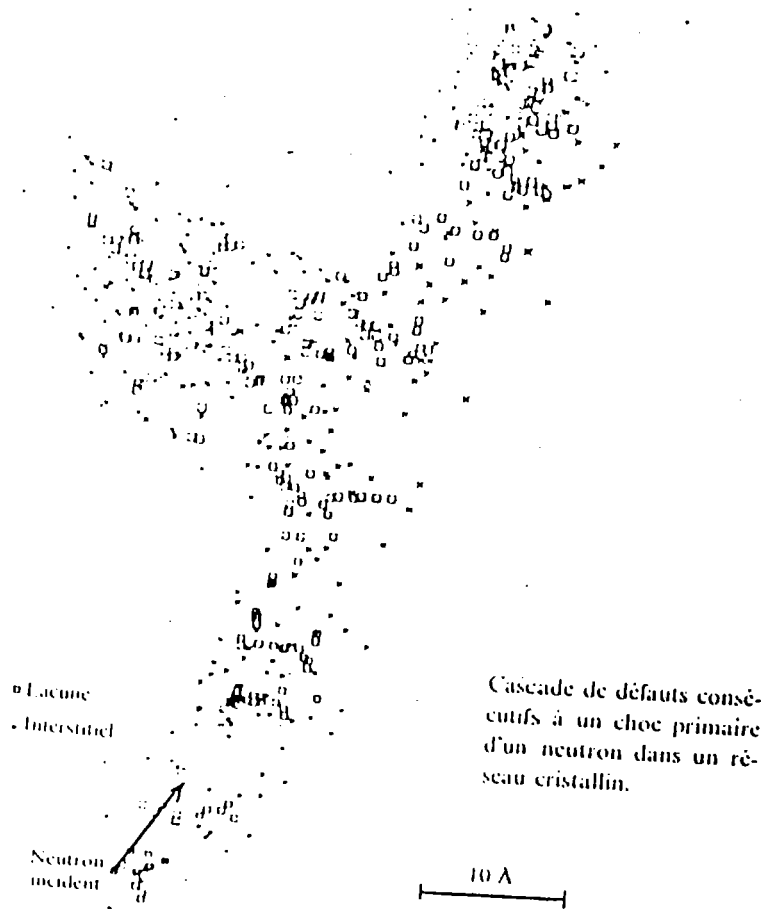
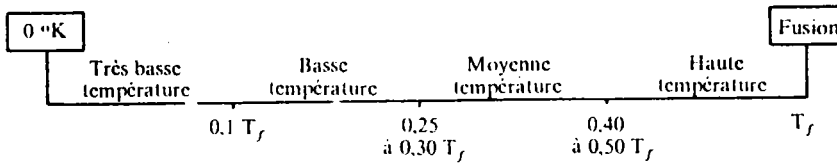


Fig. (1-1) : Cascade tracée par le calcul sur ordinateur [8]

Phénomène physique	Défaut créé	Combinaisons requises	Conséquences pratiques
Déplacements d'atomes	Paires isolées	Très basse température →	21/ Gonflement par interstitiel + Accumulation d'énergie
	Boucles	flux élevé { soit basse temp. soit conditions anisotropes →	22/ Durcissement par les boucles 23/ Précipitation dirigée des boucles: fluage et croissance à toutes températures.
	Cavités (vides)	Moyenne température →	24/ Gonflement par lacunes
Réactions nucléaires	Bulles de gaz	Hautes température →	25/ Gonflement par gaz 26/ Fragilisation intergranulaire

Tableau (1-2) : Défauts d'irradiation et leurs effets [8]

Les différentes gammes de température dans le tableau (1-2) et dans ce qui suit correspondent à :



1-2-b Phénomènes liés aux défauts ponctuels d'irradiation.

L'irradiation des matériaux par des neutrons rapides conduit à une accumulation de défauts ponctuels. Suivant la nature du matériau, la température et le flux d'irradiation, ceux-ci donnent lieu à divers types d'agglomération et finalement à divers effets macroscopiques. Parmi les plus importants, citons :

1 Le gonflement : [6-8, 12-13]

On a deux sortes de gonflement :

- a) Le gonflement par cavités, à moyenne température :

Une forme possible de l'agglomération des lacunes d'irradiation est la cavité.

Pour un nombre n de lacunes se rassemblant, l'énergie d'une cavité est proportionnelle à $n^{2/3}$ alors que l'énergie d'une boucle de dislocation lacunaire est proportionnelle à $n^{1/2}$ [14]. Il est clair que pour n assez grand ($n > n_c$), l'énergie de la cavité devient supérieure à celle de la boucle.

Le calcul situe n_c à une centaine de lacunes environ. Cependant, une cavité ayant atteint la taille critique n_c ne peut plus se transformer en boucle. Or lacunes et interstitiels sont créés en nombre égal. Les interstitiels sont préférentiellement absorbés par les dislocations. Le bilan se déséquilibre donc en faveur de lacunes qui affluent vers les cavités. Ces dernières croissent, entraînant une augmentation de volume extérieur que l'on définit par le terme gonflement.

Celui-ci, inexistant à basse ou à très haute température, passe par un maximum pour une température d'irradiation d'environ $0,4 T_f$. Il peut

atteindre une augmentation de volume $\frac{\Delta V}{V_0}$ de 1% pour des fluences de 10^{20} n/cm^2 fig (1-2).

- b)- Le gonflement par gaz à haute température :

Ce phénomène intervient à haute température pour laquelle il n'y a plus d'effet de déplacement d'atomes puisque la recombinaison devient totale. Le gonflement par gaz est dû :

- soit à la fission, avec production de produits de fission gazeux tels que le xénon et le krypton ;

- soit à des réactions (n, α) : (particule incidente un neutron : n , particule émise un noyau de l'atome d'hélium : α)

Les atomes de gaz se rencontrent par diffusion pour former des bulles qui

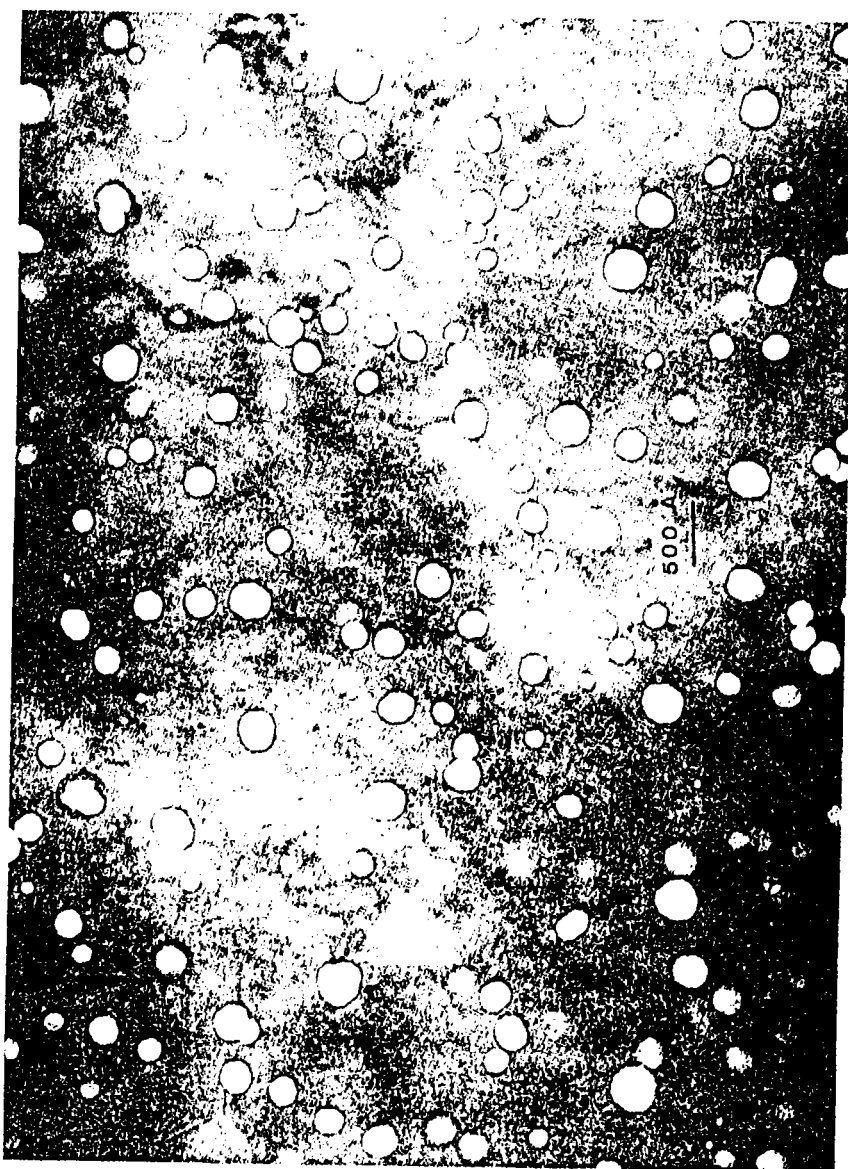


Fig. (1-2) : Micrographie électronique d'un acier 316L irradié à 460° à une fluence $5,8 \times 10^{22} \text{n/cm}^2$ montrant les cavités formées par coalescence de lacunes. Le gonflement correspondant est de 1% [8]

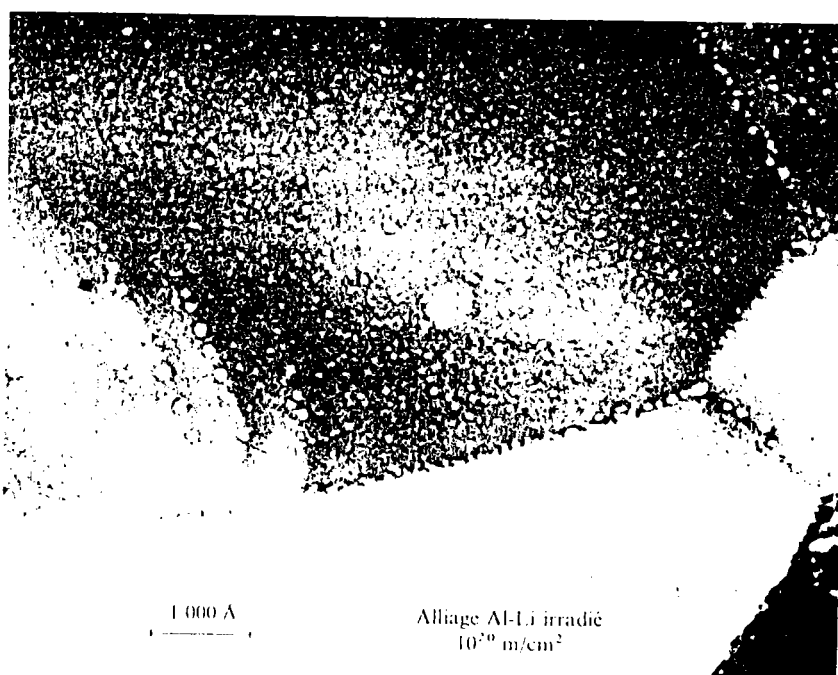


Fig. (1-3) : Précipitation de bulles d'hélium dans un alliage al-Li irradié à 10^{20}n/cm^2 [8]

coalescent : quand deux telles bulles se rencontrent, la bulle résultante a pour des raisons de tensions superficielles :

- une surface égale à la somme des surfaces : $S = S_1 + S_2$ (1-2)

- un volume supérieur à la somme des volumes : $V > V_1 + V_2$ (1-3)

Ce phénomène prend place à l'intérieur du grain. Mais très souvent, et notamment pour les réactions (n , α) dans les aciers austénitiques de gainage des éléments combustibles des réacteurs rapides, les bulles d'hélium précipitent dans les joints des grains, provoquant une fragilisation intergranulaire. Le phénomène est particulièrement visible sur la figure (1-3).

2 La croissance :

La théorie proposée par BUCKLEY [60-61], attribue la croissance à la condensation sur des plans différents, d'interstitiels et de lacunes créés par l'irradiation. Dans un matériau possédant une anisotropie cristalline, la condensation des défauts ponctuels créés par l'irradiation s'organise en boucles de lacunes et en boucles d'interstitiels. Les boucles de lacunes étant mieux placées suivant une direction cristalline et les boucles d'interstitiels étant mieux placées suivant une direction perpendiculaire [5-8]. Le monocristal se déforme alors de façon anisotrope avec allongement dans une direction préférentielle et contraction dans la direction perpendiculaire comme le montre la figure (1-4-a).

BUCKLEY [25-26] a observé sur des monocristaux de zirconium une déformation de $\epsilon_a = 3 \times 10^{-5}$ suivant la direction \vec{a} et une déformation $\epsilon_c = -6 \times 10^{-5}$ suivant l'axe \vec{c} lorsque ses monocristaux sont soumis à des fluences allant jusqu'à 10^{23} neutrons /m² et à une température de 363 K. Cette déformation s'effectue avec une conservation de volume.

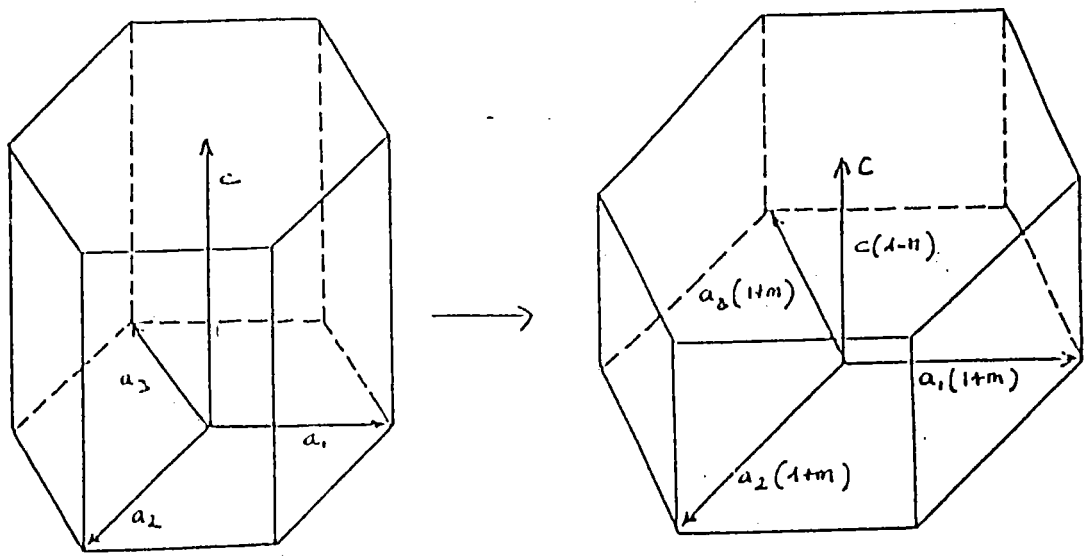
CARPENTER et AL. [27] ont effectué des irradiations aux neutrons avec des fluences allant jusqu'à 20×10^{24} n/m² à 353 K et à 553 K. Pour la fluence maximale, ils ont mesuré des contractions selon l'axe \vec{c} de $-1,75 \times 10^{-4}$ à 353 K et $-1,3 \times 10^{-4}$ à 553 K. Dans ces dernières mesures, l'influence de la température sur la croissance apparaît importante sur les figures (1-4 b) et (1-4 c).

La croissance s'est effectuée avec variation de volume dans les deux cas :

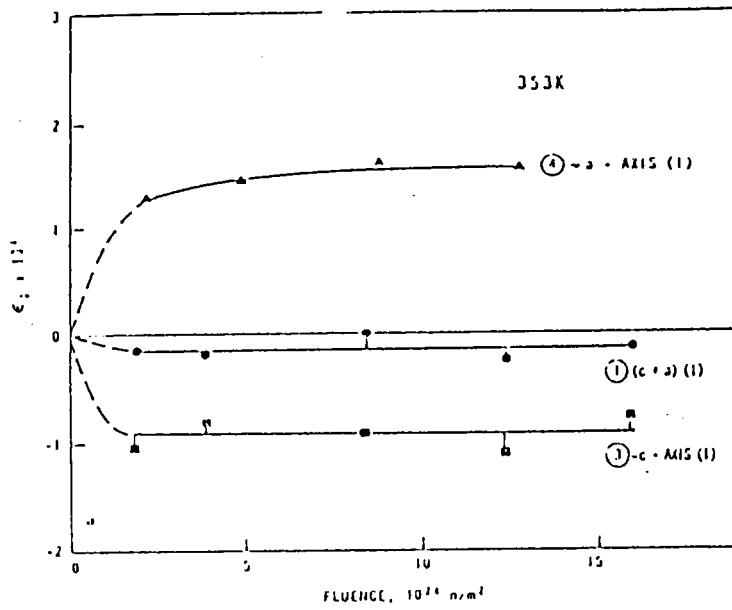
- à 353 K : $\Delta V/V_0 = 1,25 \cdot 10^{-4}$

- à 553 K : $\Delta V/V_0 = 1,4 \cdot 10^{-4}$

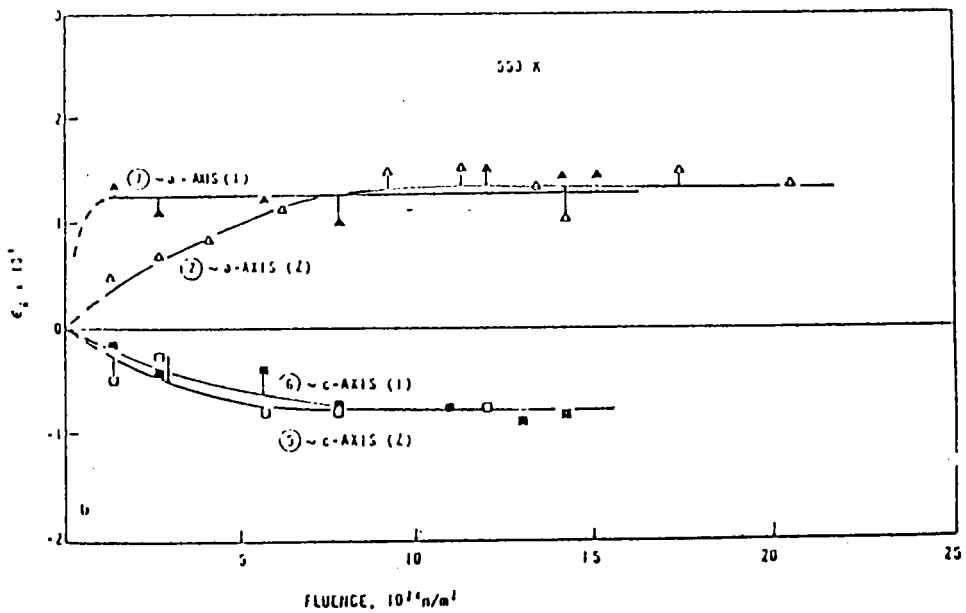
Dans le cas de certaines tôles polycristallines texturées, la croissance se traduit par un allongement suivant la direction de laminage et par une contraction suivant la direction normale.



a



b



c

Fig. (1-4) : Croissance du monocristal en fonction de la fluence à (b) 353 K (c) 553 K [27].

3 Autres effets :

Bien d'autres effets peuvent être dus aux défauts ponctuels d'irradiation. Ceux-ci peuvent durcir le métal soit par interstitiels isolés (durcissement de Fleischer [15]), soit par zones lacunaires (durcissement de Seeger) [16]. En épingleant les dislocations, ils modifient profondément les propriétés sonores [17-18]. Ils diminuent la conductibilité thermique [9]. Ils accélèrent la diffusion [19-22] et le fluage [23-24-8-5]. A l'accumulation de paires de Frenkel correspond une accumulation d'énergie interne dont la libération est connue sous le nom d'effet Wigner [5-7-9] qui est très bien connu pour le graphite.

1-2-c Comportement du zirconium et de ses alliages sous irradiation [4-5.8].

Le zircaloy est un alliage de zirconium utilisé comme matériau de gainage des réacteurs à eau ordinaire (R.E.P). Il est fragilisé dans les piles à eau à 300°. Il s'agit de la fragilisation classique à basse température (entre croisement de boucles de lacunes et d'interstitiels produisant un résultat analogue à un écrouissage) à laquelle s'ajoute la fragilisation induite par l'hydrogène (réduction de l'eau). A température plus élevée, il y a recuit des défauts et le phénomène ne se produit plus. Pour les calculs pratiques d'interaction combustible-gaine dans les éléments combustibles à oxyde, on utilise la valeur de 1% de ductilité admissible représentée sur la courbe de traction (à la résistance maximum) figure (1-5).

On constate globalement sous irradiation une augmentation de la limite d'élasticité et une diminution de l'allongement à la rupture (figure (1-6)). L'irradiation a aussi pour effet d'accélérer la corrosion et le fluage du zircaloy. A ces phénomènes s'ajoute une croissance induite par l'irradiation neutronique due à l'anisotropie cristalline du zirconium et à l'importante texture résultant des opérations de laminages au cours de la fabrication des gaines. A partir de 500° le zirconium peut absorber une grande quantité d'oxygène. Cette absorption s'accompagne d'une fragilisation très importante du métal. Les alliages zircaloy ont été mis au point pour éliminer le phénomène de desquamation dans l'eau. L'addition d'étain s'est révélée particulièrement efficace dans ce but.

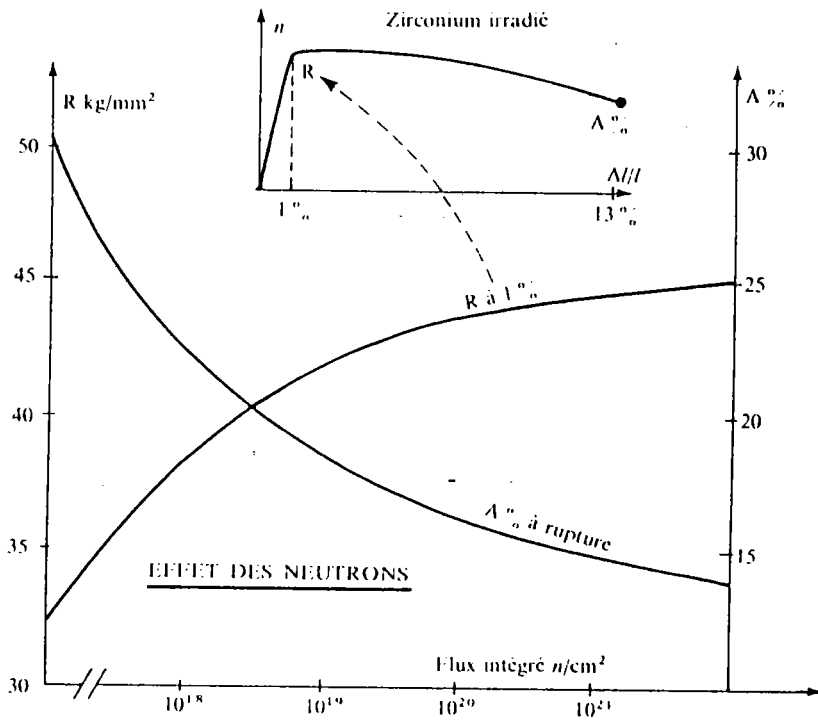


Fig. (1-5) : Effet des neutrons sur les propriétés mécaniques du Zirconium [8]

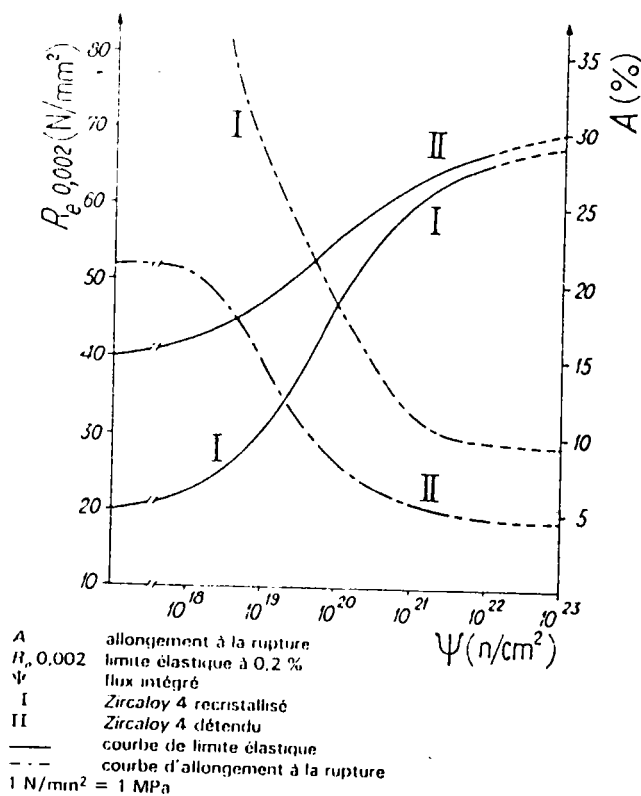


Fig. (1-6) : Action des rayonnements sur les propriétés mécaniques du Zircaloy 4 essayé à 350°C [5]

1-3- LOIS DE CROISSANCE

1-3-a Généralités

La croissance sous irradiation des matériaux dans une direction "i" peut être représentée par la relation suivante [28-40] :

$$\epsilon_i = c_i \phi t^n \quad (1-4)$$

où c_i et n : coefficients dépendant du matériau considéré,

ϕt : fluence exprimée en neutrons par cm^2 .

Le coefficient c_i dépend des différents paramètres intervenant au cours de la croissance.

1-3-b Croissance et texture [39-40, 42-45].

La croissance sous irradiation d'un matériau polycristallin hexagonal dans une direction "i" est reliée à la texture par le modèle classique suivant :

$$\epsilon_i = f_i \epsilon_c + (1-f_i) \epsilon_a \quad (1-5)$$

f_i correspond au sens statistique au moment d'ordre deux de la fonction de densité de pôles (0001) par rapport à un axe défini.

f_i est appelé paramètre d'orientation ou coefficient de Kearns [41].

ϵ_c et ϵ_a sont les déformations microscopiques suivant les directions cristallographiques [0001] et $[10\bar{1}0]$ respectivement.

En cas de conservation de volume du monocristal :

$$\frac{\Delta V}{V} = 2 \epsilon_a + \epsilon_c = 0 \quad (1-6)$$

L'équation (1-5) devient :

$$\epsilon_i = (1 - 3f_i) \epsilon_a \quad (1-7)$$

Le coefficient de croissance G_i [42-45] est défini par :

$$G_i = \frac{\epsilon_i}{\epsilon_a} = 1 - 3 f_i \quad (1-8)$$

La relation entre texture et croissance est habituellement exprimée par la relation (1-5).

1-3-c- Fluage d'irradiation et croissance.

Bien évidemment, la croissance et le fluage contribuent simultanément à la déformation en service du zircaloy. La figure (1-7) le montre en représentant la déformation longitudinale des tubes irradiés et soumis à différentes pressions internes [28]. Le phénomène de croissance étant positif dans le sens de la longueur, du fait de la texture des tubes, tandis que le fluage longitudinal, sous l'effet de la pression interne est négatif, il doit en résulter que l'allongement du tube est d'autant plus faible que la contrainte appliquée est plus élevée. C'est effectivement ce que l'on peut constater sur la figure (1-7).

Parmi les différents modèles traitant ce dernier point, le modèle développé par HOLT et IBRAHIM [36-37,46-48] est utilisé pour le calcul de la vitesse de déformation($\dot{\epsilon}_i$) de la croissance et du fluage suivant la direction "i" :

$$\dot{\epsilon}_i = \dot{\epsilon}_{gi} + \dot{\epsilon}_{ci} \quad (1-9)$$

$$\dot{\epsilon}_{gi} = K_g G_i \phi \quad (1-10)$$

$$\dot{\epsilon}_{ci} = K_c C_i \bar{\tau} \phi \quad (1-11)$$

où $\dot{\epsilon}_{gi}$, $\dot{\epsilon}_{ci}$ et $\dot{\epsilon}_i$ sont respectivement la vitesse de croissance, la vitesse du fluage, et la vitesse de déformation totale, ϕ est le flux neutronique, $\bar{\tau}$ est la contrainte appliquée (normalisée) K_g est une fonction spécifique de la vitesse de croissance qui dépend de l'état métallurgique et de la température, K_c est une fonction spécifique de la vitesse de fluage qui dépend de l'état métallurgique et de la température, C_i est le facteur de fluage anisotropique dépendant de la texture.

G_i est le coefficient de croissance dans la direction "i" dans le cas où la croissance est produite par une montée de dislocations de vecteurs de BURGERS $1/3 [11\bar{2}0]$ provoquée par l'absorption des interstitiels, en excès et causant une expansion dans les directions $\langle 11\bar{2}0 \rangle$. L'accumulation des lacunes sur les joints de grain provoque une contraction de la direction normale au joint de grain.

On peut tenir compte de ces effets en modifiant le coefficient de croissance G_i suivant la relation :

$$G_i = 1 - f_i - 2 A_i \quad (1-12)$$

où f_i est le facteur de Kearns suivant la direction "i", A_i est le facteur d'anisotropie des joints de grain dans la direction "i".

$$A_i = \frac{1}{d_i} \left(\frac{1}{d_R} + \frac{1}{d_T} + \frac{1}{d_L} \right) \quad (1-13)$$

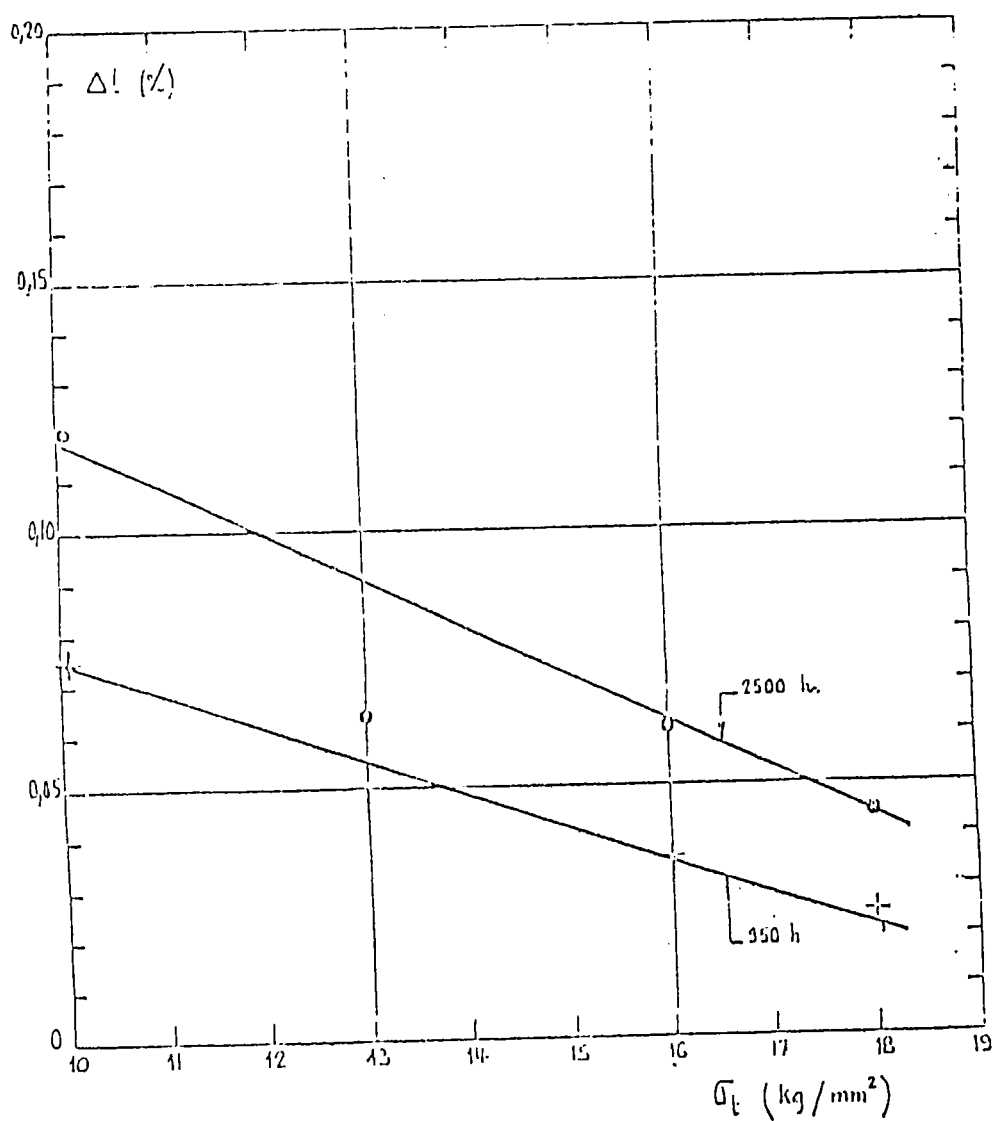


Fig. (1-7) Tubes en zircaloy soumis à une pression interne de gaz
Allongement sous irradiation à 300°C (Flux $1,8 \cdot 10^{14} \text{ n/cm}^2$) [28]

d_i , d_R , d_T , d_L étant les longueurs du grain dans les directions "i", radiale, transverse, longitudinale respectivement.

La déformation produite par le mécanisme du fluage d'irradiation est le plus souvent due à un glissement de dislocations $1/3 \langle 11\bar{2}0 \rangle$ sur les plans (1010), mais elle peut être attribuée aussi à un autre type de glissement, de dislocations probablement $1/3 \langle 11\bar{2}0 \rangle$ sur les plans (0002) [48].

Les résultats fournis par ce modèle pour l'étude de tubes [46] sont conformes avec les résultats expérimentaux de l'élongation et du fluage diamétral de tels tubes.

1-3-d - Effet de l'écroissage.

Dès 1972, on savait [49-51] que l'écroissage modifie le comportement de la croissance mais beaucoup de détails expérimentaux n'ont pas été publiés avant 1977 [52].

ADAMSON [52] a montré que la croissance du zircaloy recristallisé (ainsi que du recuit) [29] tend généralement vers une saturation à partir d'une fluence de $10 \cdot 10^{20} \text{ n/cm}^2$ (figure 1-8).

La figure (1-9) montre la croissance de quelques échantillons de texture identique soumis à une fluence près de $20 \times 10^{20} \text{ n/cm}^2$. Le maximum de la croissance apparaît entre 200 et 300°C.

La figure (1-10) montre qu'à une fluence de $10 \cdot 10^{20} \text{ n/cm}^2$, la croissance augmente linéairement avec le taux d'écroissage du matériau (toujours pour des matériaux de texture identique).

La figure (1-11) montre aussi que la croissance augmente avec l'augmentation du taux d'écroissage avec les conditions d'irradiations suivantes :

- la fluence moyenne de $15 \cdot 10^{20} \text{ n/cm}^2$;
- la température d'irradiation, $T_{IRR} = 343^\circ\text{C}$.

La relation entre le taux d'écroissage et la croissance s'exprime selon [52] par :

$$G = G_0 + MC \quad (1-14)$$

G = La croissance d'irradiation du matériau détendu (écrouis),

G_0 = La croissance d'irradiation du Zircaloy recristallisé,

C = taux d'écroissage,

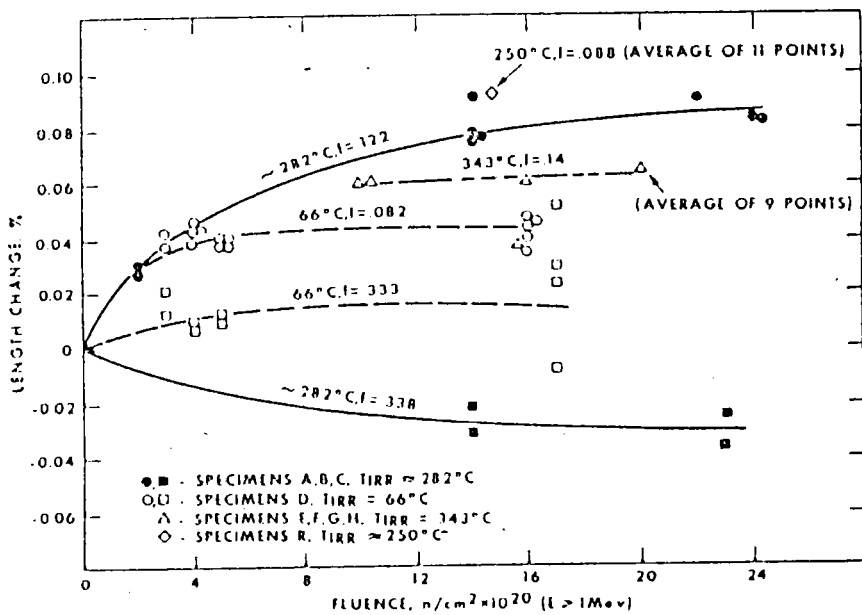


Fig. (1-8) : Croissance de Zircaloy recristallisés en fonction de la fluence. [52]

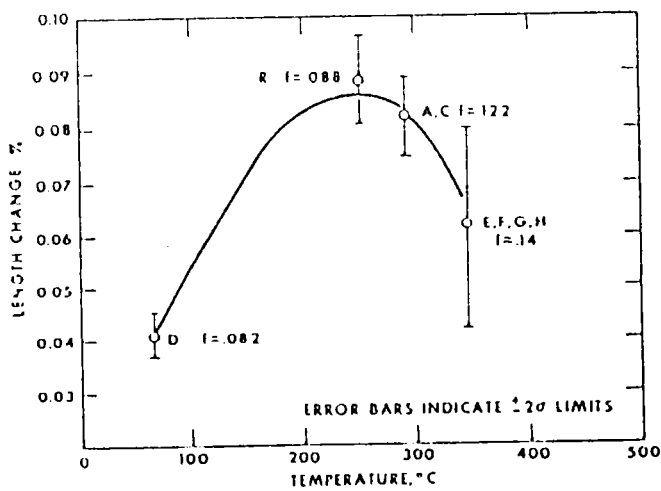


Fig. (1-9) : Croissance de Zircaloy recristallisés en fonction de la température, à fluence fixée $2 \cdot 10^{21} n/cm^2$. [29]

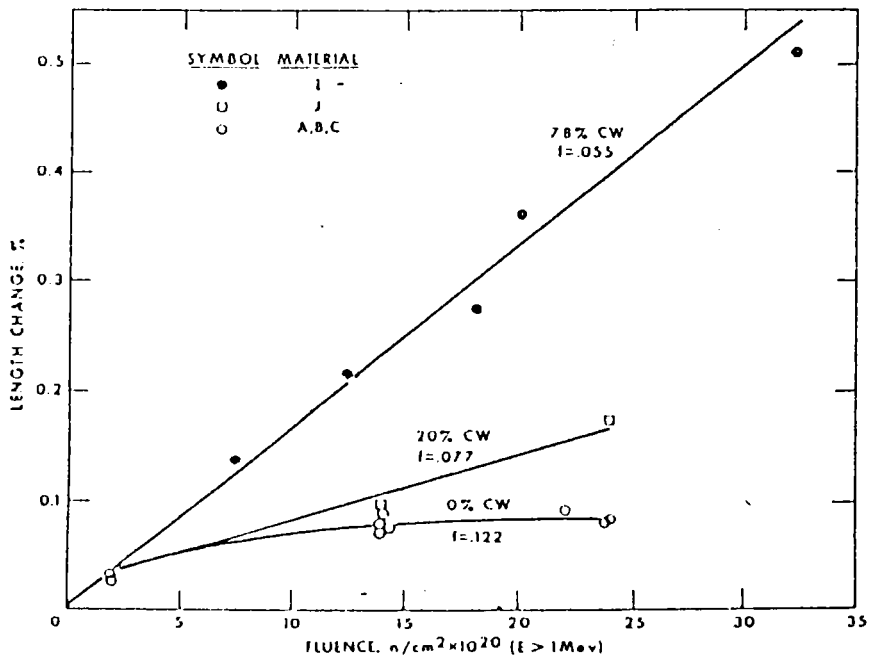


Fig. (1-10) : Croissance de Zircaloy-4 en fonction de la fluence à 282°C. [29]

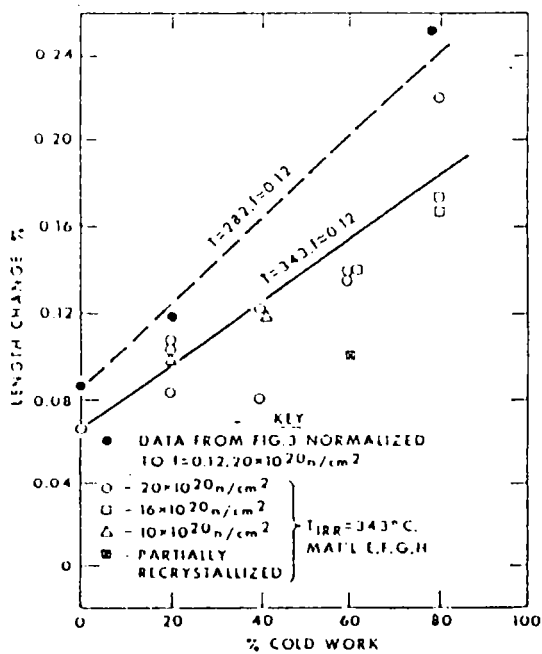


Fig. (1-11) : Croissance en fonction du taux d'écrouissage. [29]

Le coefficient M dépend de la température, par exemple [52] :

$$M = 1,5 \times 10^{-3} \text{ pour } T = 343^\circ\text{C}$$

$$M = 20 \times 10^{-3} \text{ pour } T = 282^\circ\text{C}.$$

FIDLERIS et Al. [53] ont étudié l'influence du taux d'écroissage et du traitement thermique de détente sur des tôles de Zircaloy-2, lors de la croissance sous irradiation. Les résultats obtenus, montrent clairement que les matériaux qui ont subi le traitement de détente (1h à 770 K) après écroissage croissent davantage que ceux qui sont uniquement écrois. Ceci a été vérifié pour des faibles taux d'écroissage : 0,25 %, 1,5 % et 3,3 %. Par contre, pour des taux d'écroissage supérieurs (12,3 % et 25,7 %) les conclusions sont inversées puisque les matériaux détendus grandissent moins que ceux qui n'ont pas subi le traitement thermique précité. L'ensemble des résultats est présenté sur la figure (1-12).

Dans le cas des réacteurs à neutrons rapides, les gaines en aciers austénitiques sont limitées à des écroissages moyens (20 %) par la nécessité d'éviter la recristallisation des parties les plus chaudes des gaines, avec les conséquences défavorables que l'on sait sur la tenue au fluage [54].

1-3-e Croissance et densité de dislocation.

L'influence de la densité de dislocation sur la vitesse de croissance dépend des états métallurgiques des matériaux.

La figure (1-13) montre la variation de la vitesse de croissance en fonction de la densité de dislocation pour 3 tôles de zircaloy-2 d'états métallurgiques différents.

La vitesse de croissance des tôles détendues et recristallisées varie linéairement avec la densité de dislocation, avec une pente plus accentuée dans le cas détendu.

La tôle écroie par contre suit une variation non linéaire jusqu'à environ $3,5 \cdot 10^{21} \text{ m}^{-2}$ et ce n'est qu'à partir de cette valeur que la loi devient linéaire [53].

Les équations (1-10) et (1-11) mettent en évidence la dépendance de la densité de dislocation sur les variations dimensionnelles :

$$\dot{\epsilon}_{gi} = \alpha \rho^{n1} \exp - \frac{Q_1}{kT} \times G_i \times \phi \quad (1-15)$$

$$\dot{\epsilon}_{ci} = \beta \rho^{n2} \exp - \frac{Q_2}{kT} \times G_i \times \phi \quad (1-16)$$

où : T est la température absolue ;

ρ est la densité de dislocation ;

Q_1 une énergie d'activation (dans le cas de croissance) ;

Q_2 une énergie d'activation (dans le cas du fluage d'irradiation) ;

k constante de Boltzmann ;

α, β, n_1 et n_2 sont des constantes dépendant de la structure métallurgique,

dans le cas de la figure (1-14) : $n_1 = 0,82$, $n_2 = 0,16$.

1-3-f Effet de taille de grains.

Pour le moment il n'y a que peu de données sur l'effet de la taille de grains sur la croissance.

MURGATROYD et ROGERSON [55] ont observé qu'à 353 K la croissance du zirconium polycristallin est faiblement sensible à la taille de grains dans un domaine allant de 5 à 40 μm . Par contre à 553 K ils ont observé une nette dépendance de la taille de grains, les échantillons ayant des tailles de grains de 5 μm se déforment plus vite que ceux de 40 μm .

FIDLERIS et Al. [29] ont conclu que la croissance des matériaux de zircaloy-2 recristallisé ayant des tailles de grains de 12 μm est plus forte que celle de ceux possédant des grains de 31 μm et que cette différence augmente avec la croissance de la température de 647 à 686 K fig. (1-15).

Dans le cas du zirconium recristallisé, les différences sont observées dans le comportement de la croissance à 330 K pour des grains de 23 μm et 225 μm , la croissance du matériau de grain 23 μm est plus forte que celle de l'échantillon de taille de grain de 225 μm . A 330 K la croissance de zircaloy-2 de taille de grain 31 μm est plus faible que celle de l'échantillon de taille de grain de 12 μm figure (1-16).

1-4- Effet de la composition chimique sur la croissance.

Différents auteurs montrent que la composition chimique a certainement une influence sur la croissance sous irradiation mais n'est pas décrite sous forme analytique.

1-4-a Effet de l'oxygène.

La teneur en oxygène du zirconium modifie le taux de croissance. FIDLERIS et Al. [29] ont montré que la croissance (à 680 - 710 K et pour une fluence de $16,8 \cdot 10^{25} \text{n/m}^2$) d'échantillons d'iodure de zirconium recristallisé de 150-350 ppm d'oxygène est moins importante que celle de l'éponge de zirconium contenant 970-990 ppm d'oxygène, ce dernier produit une croissance exagérée "Break Away" à 698 K, proche de celle des zircalloys.

1-4-b. Effet du niobium.

Les atomes de niobium sont supposés se fixer préférentiellement aux interstitiels d'atomes de zirconium, ce qui diminue leur mobilité, et la possibilité de recombinaison augmente ce qui limite la croissance [32]. Un autre rôle important des atomes de niobium est la stabilisation de la structure des dislocations à haute température.

1-4-c Effet de l'étain.

ZEE et Al. [56] ont montré que les additions de Sn (au Zr) jusqu'à 1,5 % n'ont pas d'effet sur la croissance à 553 K, mais à 353 K ils ont constaté une atténuation de la croissance de Zr - 1,5 % qui est due à une recombinaison intense de lacunes avec les atomes de Sn. Dans le cas des zircalloys, l'étain s'est révélé particulièrement efficace pour l'élimination du phénomène de desquamation dans l'eau [8].

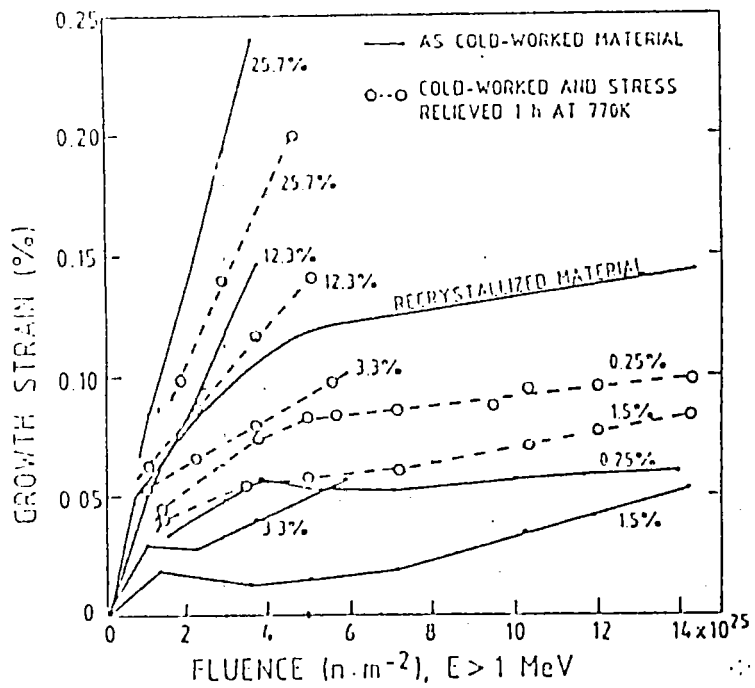


Fig. (1-12) : Croissance (suivant le sens long) de tôles de Zircaloy-2 écrouie, détendue et recristallisée. [53]

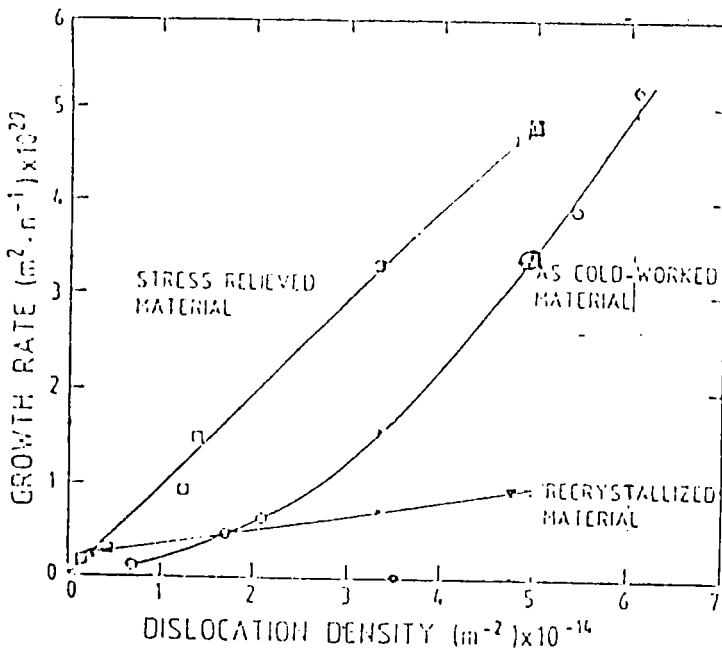


Fig. (1-13) : Croissance de Zircaloy-2 à 330K en fonction de la densité de dislocation d'après les résultats de la fig. (1-12) [53]

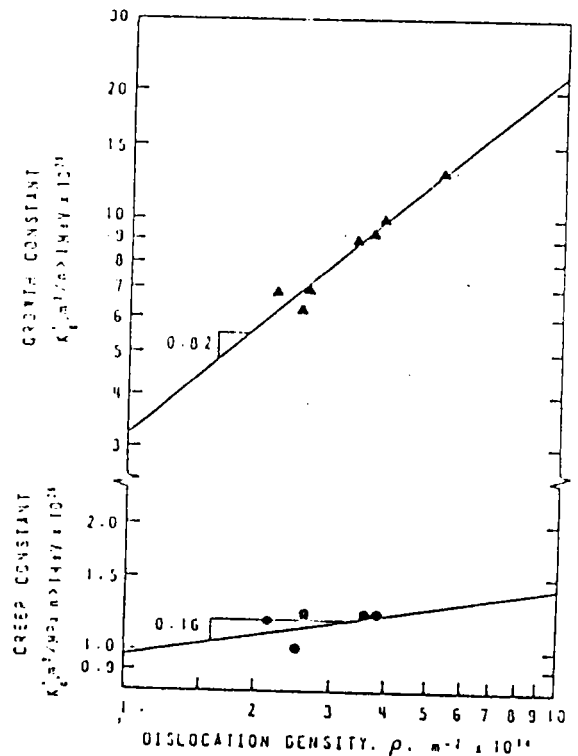


Fig. (1-14) : Influence de la densité de dislocation sur les vitesses de fluage et de croissance sur des tubes de Zircaloy-2 [53]

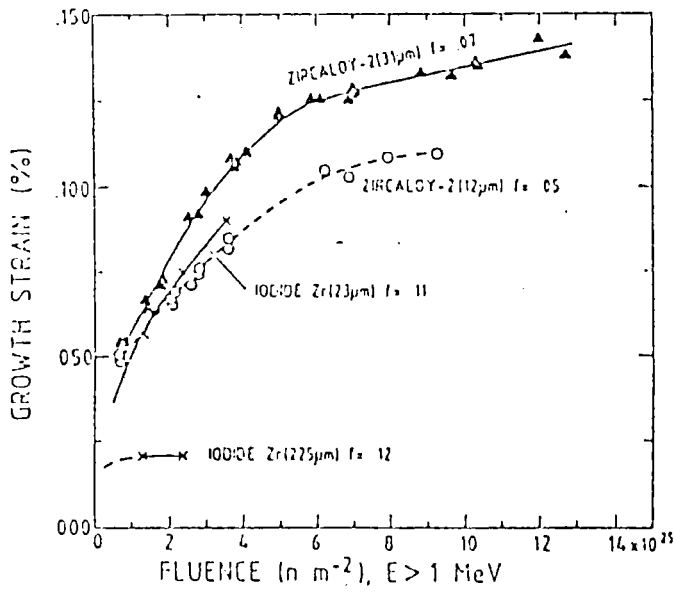


Fig. (1-15) : Effet de taille de grain sur la croissance de Zirconium recristallisé et de Zircaloy-2 à 330 K [29].

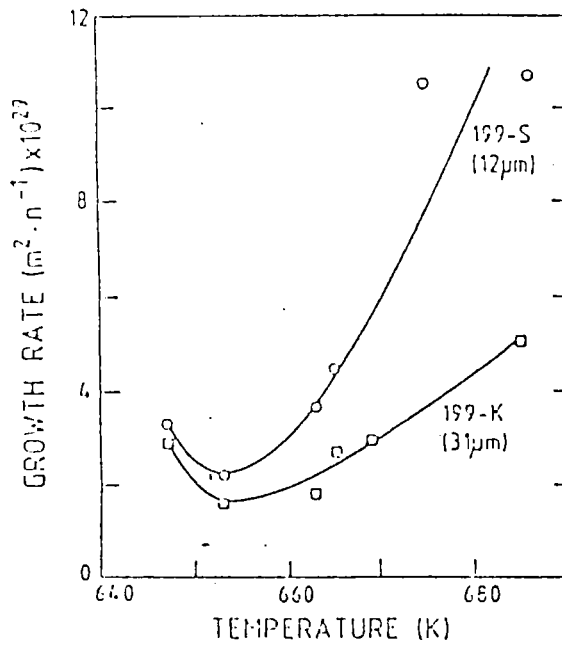


Fig. (1-16) : Effet de la taille de grain sur la croissance de Zircaloy-2 recristallisé (de 647 K à 686 K) [29].

1-5 CONCLUSION

a) La composition chimique :

Les travaux étudiés dans cette bibliographie montrent que les impuretés influent considérablement sur la croissance. L'effet des additions mineures (Fe, Cr, Ni) jouent un rôle important dans l'atténuation de la croissance. De nombreux auteurs [57-59] postulent un effet similaire pour le niobium et l'étain dans les alliages à base de zirconium, où ils piègent les défauts ponctuels d'irradiation et stabilisent les dislocations [32].

b) Croissance

La théorie proposée par BUCKLEY [60-61], actuellement admise, attribue la croissance à la condensation sur des plans différents, d'interstitiels et de lacunes créés par l'irradiation. Dans le cas du zirconium BUCKLEY [25] explique le phénomène par la formation de boucles de lacunes sur les plans basaux et de boucles d'interstitiels sur les plans prismatiques. Si tous les interstitiels et les lacunes se condensent dans de telles boucles, le volume se conserve et la croissance se produit par une montée de dislocation de vecteur de BURGERS $1/3 [11\bar{2}0]$ qui provoque une expansion suivant les axes $\langle a \rangle$. HESKETH et Al. [62] ont postulé que la contraction de l'axe $\langle c \rangle$ est due à un transfert d'atomes des plans basaux vers les plans prismatiques.

c) Croissance et écrouissage.

La différence de croissance entre les matériaux recristallisés et détendus semble due aux effets de taille de grains des polycristaux et à la structure des boucles de dislocations.

En général, les grandeurs de déformation provoquées par la croissance sont similaires pour les zircalloys recristallisés et écrouis à haute température et pour des fluences élevées [32].

La relation reliant de façon plus satisfaisante la croissance (G) d'un matériau écroui aux taux d'écrouissage est fourni par la relation $G = G_0 + MC$.

d) Texture

Le modèle de croissance sous irradiation utilise les paramètres d'orientations f_i . En théorie ces paramètres peuvent être obtenus à partir de l'exploitation de la figure de pôles complète (0001). Toutefois en raison de la difficulté pour mesurer expérimentalement des figures de pôles complètes d'une part et pour minimiser l'ensemble des erreurs expérimentales d'autre part, il est préférable de déterminer la fonction de distribution des orientations à partir de plusieurs figures de pôles incomplètes et d'exprimer les paramètres d'anisotropie f_i à partir de cette fonction. C'est la façon d'opérer que nous avons développée et qui est exposée dans le chapitre III de ce travail.

Pour certaines conditions expérimentales et pour des états métallurgiques spécifiques la loi de croissance est corrélée de manière simple avec les coefficients décrivant la fonction de distribution des orientations. Ce point sera discuté dans les chapitres suivants.

REFERENCES DU PREMIER CHAPITRE

- [1] P. MORIZE "Structure des réacteurs nucléaires" Matériaux de gainage : Mg, zr. T.D.I. B3700.
- [2] J. HERENGUEL "Métallurgie spéciale. Tome III : Le zirconium et ses alliages " Saclay. Bibliothèque des sciences et techniques nucléaires 1962.
- [3] P. PASCAL "Nouveau traité de chimie minérale" Tome IX. Paris-Masson 1963.
- [4] C. RENAUT "Recherche de l'amélioration des caractéristiques mécaniques d'un alliage nucléaire à base de zirconium. Etudes des relations entre la texture et le comportement au fluage". Mémoire de diplôme d'ingénieur. C.N.A.M. LYON.
- [5] M. GAUTHRON "Comportement des matériaux dans le coeur d'un réacteur nucléaire" T.D.I. B3760. 1984.
- [6] Y. QUERE "Défauts ponctuels dans les métaux " Masson -Paris 1967.
- [7] J. BENARD, A. MICHEL, J. PHILIBERT et J. TALBOT "Métallurgie générale" Masson, Paris 1984.
- [8] M. GAUTHRON "Introduction au génie nucléaire" Tome 1- INSTN-CEA. Collection enseignement.
- [9] Y. ADDA- J.M. DUPOUY- J. PHILIBERT- Y. QUERE "Element de Métallurgie physique". Tome 3- Alliages et défauts. INSTN- CEN SACLAY.
- [10] F. SEITZ- Disc. Faraday. Soc. 5,271 (1949)
- [11] W. S. SNYDER, J. NEUFELD - Phys. Rev., 97, 1636 (1955).
- [12] C.H. de NOVION et D. LESUEUR "L'état métallique- propriétés atomiques" T.D.I. M36-12.
- [13] G. SAADA et A. ZAOUI "Déformation plastique" T.I. M 45
- [14] Y. QUERE "Physique des matériaux" Cours et problèmes - ellipses - 1988.
- [15] R.L. FLEISCHER - Acta Met. 10 ,935 (1962).
- [16] A. SEEGER - 2ème Conf. de Genève sur l'énergie atomique, 6, 250 (1958).
- [17] D.O. THOMPSON et D.K. HOLMES. J. Appl. phys. 27, 713 (1956)
- [18] J.N. LOMER - Phil. Mag, 8, 951 (1963)
- [19] G.J. DIENES et A.C. DAMASK - J. Appl. Phys., 29, 1713 (1958)
- [20] A.C. DAMASK - Symposium A.I. E.A, Venise (1962)

- [21] M.S. WECHSLER et R.H. KERNOHAN- Radiation damage in solids, symposium A.I.E.A (1962)
- [22] W. SCHÜLE - Phys. Letters, 14, 81 (1965)
- [23] J.M. FRENKEL "Influence des conditions de fabrication sur les propriétés mécaniques et particulièrement sur la résistance au fluage des gaines en zircaloy" Mécanique. 300. décembre 1974. p. 14.
- [24] C.C. DOLLINS, F.A. NICHOLS "Mechanisms of irradiation creep in zirconium base alloys" Zirconium in nuclear application". A.S.T.M. STP 551-1974.
- [25] S.N. BUCKLEY, in: Proc. Intern. conf. on Properties of reactor materials and the effects of radiation damage, Ed. D.J. Littler (Butterworths London, 1962) p.413
- [26] S.N. BUCKLEY, in. Report of discussions at institute of Metals spring Meeting, J. Inst. Metals 97 (1969) 61.
- [27] G.J.C. CARPENTER et al. "Irradiation growth of zirconium single crystals" JNM 101 (1981) 28-37.
- [28] P. MORIZE "Les effets des textures sur les propriétés des matériaux" Symposium- Metz - Decembre 1983
- [29] V. FIDLERIS, R.P. TUCKER, R.B. ADAMSON "An overview of microstructural and experimental factors that affect the irradiation growth behaviour of zirconium alloys" ASTM STP 939 p.49- 85 (1987)
- [30] A. ROGERSON et R.A. MURGATROYD "Effects of texture and temperature cycling on irradiation growth in cold-worked zircaloy - 2 at 353 and 553 K " JNM 80 (1979) 253-259
- [31] R.B. ADAMSON, R.P. TUCKER, and V. FIDLERIS "High temperature irradiation growth in zircaloy" ASTM STP 754 p. 208 (1982)
- [32] R.P. TUCKER, V. FIDLERIS and R.B. ADAMSON "High fluence irradiation growth of zirconium alloys at 644 to 725 K" ASTM STP 824 p. 427 (1984)
- [33] R. ROGERSON and R.A. MURGATROYD "Irradiation growth in annealed Zr- 2,5 wt % Nb at 353" JNM 80 (1979) 260.
- [34] R.H. ZEE, A. ROGERSON, C.J.C. CARPENTER, J. WATTERS "Effect of Tin on the irradiation growth of polycrystalline zirconium" JNM 120 (1984) 223.
- [35] V. FIDLERIS "The irradiation creep and growth phenomena" JNM 159 (1988) 22-42
- [36] E.F. IBRAHIM, R.A. HOLT "Anisotropy of irradiation creep and growth of zirconium alloys at 644 to 725 K" ASTM STP 824 p.427 (1984)
- [37] E.F. IBRAHIM "Deformation of cold-drawn tubes of zr-2,5 wt% Nb after 7 years in reactor" JNM 118 (1983) 260.

- [38] A. ROGERSON "Irradiation growth in zirconium and its alloys" JNM 159 (1988) 43.
- [39] R.A. MURGATROYD, A. ROGERSON "Irradiation growth in annealed zircaloy-2 'JNM 79 (1979) 302.
- [40] P.A. TEMPEST "Preferred orientation and its effect on bulk physical properties of hexagonal polycrystalline materials" JNM 92 (1980) 191-200
- [41] J.J. KEARNS, WAPD-TM - 472 (1965)
- [42] R.V. HESKETH, J.E. HARBOTTLE, N.A. WATERMAN and R.C. LOBB in "Radiations damage in reactor materials" IAEA, VIENNA, 1969, P.365.
- [43] E.F. IBRAHIM and J.E. WINEGAR, JNM 45 (1972) 335
- [44] S.N. BUCKLEY and S.A. MANTHORPE, JNM 90 (1980) 169
- [45] W.K. ALEXANDER, V. FIDLEVIS and R.A. HOLT, ASTM Special Technical publication n° 633, 1977, p.344
- [46] R.A. HOLT and E.F. IBRAHIM, Acta Metallurgica, vol. 27, 1979 p. 1319.
- [47] R.A. HOLT "Microstructure dependence of irradiation creep and growth of zirconium alloys" JNM 9 (1980) 193-204
- [48] R.A. HOLT "Effect of microstructure on irradiation creep and growth of zircaloy pressure tubes in power reactors" JNM 82 (1979) 419-429
- [49] R.V. HESKETH, J.N.M. vol. 26,1968, p.77
- [50] R.B. ADAMSON "Discussion on irradiation embrittlement and creep in fuel cladding and core components" Proceeding of BNES conference London, 1972, p. 305.
- [51] V. FIDLERIS J.N.M. vol.46, 1973 p.356
- [52] R.B. ADAMSON "Irradiation growth of zircaloy" ASTM, STP 633, 1977, p. 326-343.
- [53] V. FIDLERIS, A.R.CAUSEY, R.A. HOLT "Optimizing materials for nuclear application" F.A. Garner, D.S. GELLES, F.W. WIFFEN ed. Metallurgical Society of Aime, Warrendale 1985.
- [54] Y. ADDA, J.M. DUPOUY, J. PHILIBERT, Y. QUERE "Element de métallurgie physique" Tome 6, corrosion oxydation.
- [55] R. A. MURGATROYD and A. ROGERSON "Proceedings of BNES conference on "dimensional stability and mechanical behaviour of irradiated metals and alloys" London, vol. 2, 1984, p.93.
- [56] R.H. ZEE, A. ROGERSON, G, J.C. CARPENTER, J. WATTERS JNM 120 (1984) 223
- [57] R.A. MURGATROYD, A. ROGERSON - JNM 90 (1980) 240

- [58] S.N. BUCKLEY, M.R. HAYNS- JNM 89 (1980) 283
- [59] S.N. BUCKLEY, S.A. MANTHOPRE - JNM 90 (1980) 169
- [60] S.N. BUCKLEY, Rapport A.E.R.E., R 3674 (1961)
- [61] S.N. BUCKLEY, Rapport A.E.R.E., R 5262 (1966)
- [62] R.V. HESKETH, J.E. HARBOTTLE, N.A. WATTERMANN and K.C. LOBB in
Radiation damage in Reactor materials (I AEA, Vienna, 1969) p. 365.

CHAPITRE II

ANALYSE TRIDIMENSIONNELLE DES TEXTURES.

- 2-1. INTRODUCTION
- 2-2. ORIENTATIONS ET SYMETRIES.
- 2-3 FONCTION DE TEXTURE.
 - 2-3-a Définition de la fonction de texture
 - 2-3-b Propriétés d'invariance de la fonction de Texture.
 - 2-3-c Représentation de la Fonction de Texture
- 2-4 DENSITE DE POLES - FIGURES DE POLES.
 - 2-4-a Pôle
 - 2-4-b Densité de Pôle
 - 2-4-c Projection stéréographique
 - 2-4-d Développement en série de la fonction densité de pôles $P_h(y)$.
 - 2-4-e Développement en série de la fonction densité de pôles inverse $R_y(h)$
- 2-5. FONCTION DE DISTRIBUTION BIAXIALE
- 2-6. EFFET DES SYMETRIES SUR LE CALCUL DE LA F.D.O. ET $P_h(y)$
 - 2-6-a Effet des symétries sur le calcul de la F.D.O.
 - 2-6-b Effet des symétries sur le calcul de $P_h(y)$
- 2-7. CONCEPTION DES PROGRAMMES
- 2-8. DETERMINATION DES FIGURES DE POLES
- 2-9. CONCLUSION

2-1 INTRODUCTION :

Dans ce chapitre nous présentons les aspects de l'analyse tridimensionnelle des textures nécessaires au calcul des propriétés physiques moyennes uniaxiales et le principe de la méthode de mesure des figures de pôles.

Dans le cadre de ce travail, on admet que la texture est homogène, c'est à dire que la texture locale est la même dans toutes les régions, ce qui est souvent une bonne approximation utilisée par la plupart des expérimentateurs [1].

2-2. ORIENTATIONS ET SYMETRIES.

Soient K_A et K_B deux repères orthonormés directs supposés liés respectivement l'un à l'échantillon et l'autre au cristallite. Nous admettons que ces deux repères ont la même origine ; en effet, l'analyse tridimensionnelle des textures ne prend en considération que l'orientation d'un cristallite et non pas sa position par rapport au repère d'échantillon.

L'orientation d'un cristal peut être définie comme la rotation g qui amène le repère de référence K_A lié à l'échantillon au repère K_B lié au réseau cristallin d'un grain. Dans le formalisme établi par Bunge [2,3] la rotation g est décrite par trois angles, les angles d'Euler notés $\varphi_1, \phi, \varphi_2$:

$$g = (\varphi_1, \phi, \varphi_2) \quad (2-1)$$

avec les limitations suivantes :

$$0 \leq \varphi_1 \leq 2\pi$$

$$0 \leq \phi \leq \pi$$

$$0 < \varphi_2 \leq 2\pi$$

Souvent on représente symboliquement la transformation de K_A en K_B par :

$$K_B = g K_A \text{ avec } g \in \text{So}(3) \quad (2.2)$$

$\text{So}(3)$ désigne le groupe continu des rotations de l'espace à trois dimensions.

L'orientation est ainsi déterminée par la rotation g (figure 2.1) qui peut se décomposer en une suite de rotations élémentaires autour d'axes privilégiés de repères intermédiaires (figure 2.2).

Une première rotation d'angle φ_1 autour de l'axe Z du repère K_A mène ce dernier sur K' .

Une seconde rotation d'angle ϕ autour de l'axe X' du repère K' mène ce dernier sur K'' .

Une dernière rotation d'angle φ_2 autour de l'axe Z'' du repère K'' mène ce dernier sur K_B .

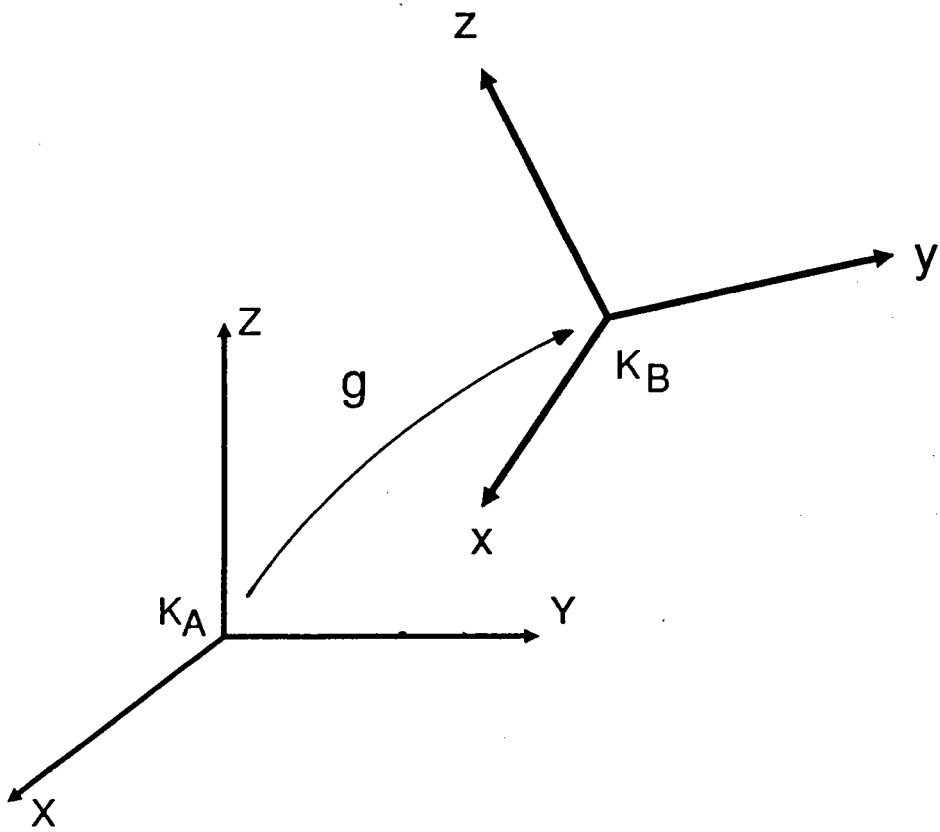


Fig.(2-1) : La rotation g qui amène K_A en coïncidence avec K_B .

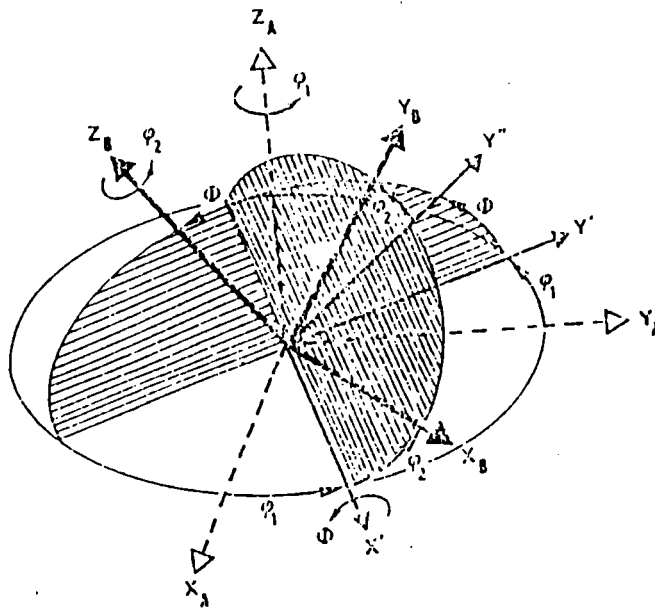


Fig. (2-2) : Définition des angles d'Euler (ϕ_1, ϕ, ϕ_2) qui amènent le repère d'échantillon K_A sur le repère cristallin K_B .

Considérons une direction particulière dans un grain d'orientation définie par les 3 rotations $\varphi_1, \phi, \varphi_2$.

Cette direction est repérée dans le cristal par le vecteur unitaire \vec{u} de composantes, en coordonnées sphériques :

$$\begin{aligned} U_{XB} &= \sin\theta \cos \gamma \\ U_{YB} &= \sin \theta \sin \gamma \\ U_{ZB} &= \cos \theta \end{aligned} \quad (2-3)$$

Les angles θ et γ sont définis sur la figure (2.3.a).

Dans l'échantillon, cette même direction de l'espace correspond à un vecteur unitaire \vec{e} de composantes, en coordonnées sphériques :

$$\begin{aligned} e_{XA} &= \sin \alpha \cos \beta \\ e_{YA} &= \sin \alpha \sin \beta \\ e_{ZA} &= \cos \alpha \end{aligned} \quad (2-4)$$

Les angles α et β sont définis sur la figure (2-3.b.).

La rotation faisant passer du référentiel échantillon au référentiel cristal s'exprime alors par la relation matricielle suivante :

$$\begin{bmatrix} U_{XB} \\ U_{YB} \\ U_{ZB} \end{bmatrix} = [g(\varphi_1, \phi, \varphi_2)] \begin{bmatrix} e_{XA} \\ e_{YA} \\ e_{ZA} \end{bmatrix} \quad (2-5)$$

où $[g(\varphi_1, \phi, \varphi_2)]$ [4] est la matrice de rotation suivante :

$$[g(\varphi_1, \phi, \varphi_2)] = \begin{bmatrix} \cos\varphi_2 & \sin\varphi_2 & 0 \\ \sin\varphi_2 & \cos\varphi_2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\phi & \sin\phi \\ 0 & -\sin\phi & \cos\phi \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos\varphi_1 & \sin\varphi_1 & 0 \\ -\sin\varphi_1 & \cos\varphi_1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (2-6)$$

soit : $[g(\varphi_1, \phi, \varphi_2)] =$

$$\begin{bmatrix} \cos \varphi_1 \cos \varphi_2 - \sin \varphi_1 \sin \varphi_2 \cos \phi, & \sin \varphi_1 \cos \varphi_2 + \cos \varphi_1 \sin \varphi_2 \cos \phi, & \sin \varphi_2 \sin \phi \\ -\cos \varphi_1 \sin \varphi_2 - \sin \varphi_1 \cos \varphi_2 \cos \phi, & -\sin \varphi_1 \sin \varphi_2 + \cos \varphi_1 \cos \varphi_2 \cos \phi, & \cos \varphi_2 \sin \phi \\ \sin \varphi_1 \sin \phi & -\cos \varphi_1 \sin \phi & \cos \phi \end{bmatrix}$$

(2-7)

En raison de la symétrie de certains réseaux cristallins, le choix du repère K_B n'est pas unique. On constate que la rotation g_i qui mène K_A sur un des repères K_{B_i} (dédit du repère K_B par la rotation S_i : élément du groupe de symétrie du réseau cristallin) décrit la même orientation puisque le réseau cristallin reste inchangé.

Cette suite d'opération est représentée selon le schéma (figure 2-4)

$$K_A \xrightarrow{g} K_B \xrightarrow{S_i} K_{B_i} \quad (2-8)$$

$g''_i = S_i g$

On peut alors définir l'orientation comme la famille des rotations $\{S_i\}_{i=1 \dots k}$ engendrée par tous les éléments (S_i) du groupe de symétrie rotationnelle du réseau cristallin [5,6].

k : étant l'ordre du groupe de symétrie rotationnelle du réseau cristallin. Dans le cas d'un réseau hexagonal, l'orientation est définie par 12 rotations équivalentes par symétrie car l'ordre du groupe de symétrie du réseau hexagonal est égal à 12.

2-3. FONCTION DE TEXTURE

Un échantillon polycristallin est formé par un ensemble de cristallites ou grains, que l'on considère en simplifiant comme des domaines monocristallins, diversement disposés au sein du polycristal figure (2-5), et séparés les uns des autres par des joints de grains. Si l'orientation des grains n'est pas aléatoire, on dit dans ce cas que le polycristal présente une texture [1].

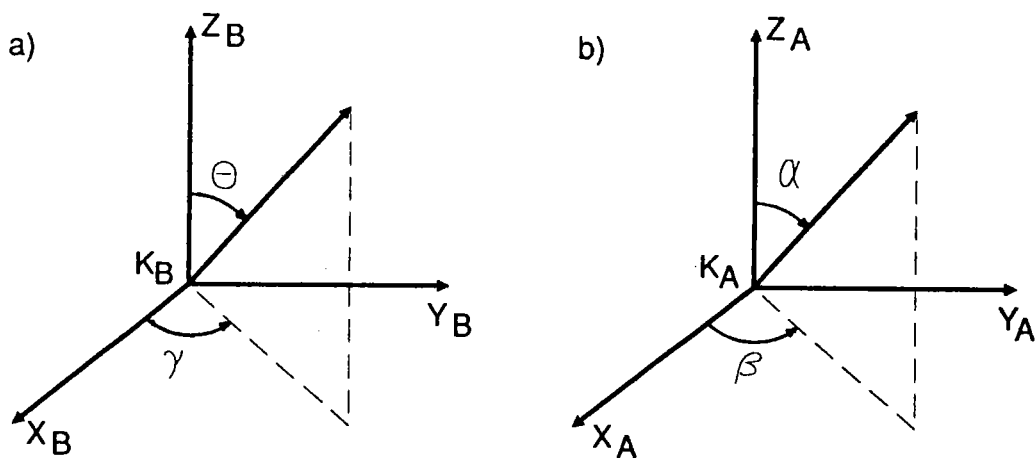


Fig. (2-3) : Définition des coordonnées sphériques d'une direction dans le référentiel :
 a- $(X_B Y_B Z_B)$ lié au cristal
 b- $(X_A Y_A Z_A)$ lié à l'échantillon

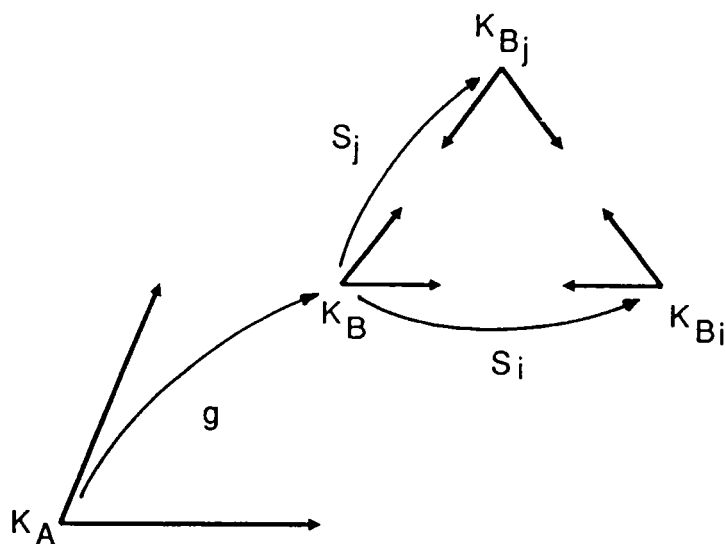


Fig. (2-4) : Rotations équivalentes $S_j.g$ correspondants à une même orientation.

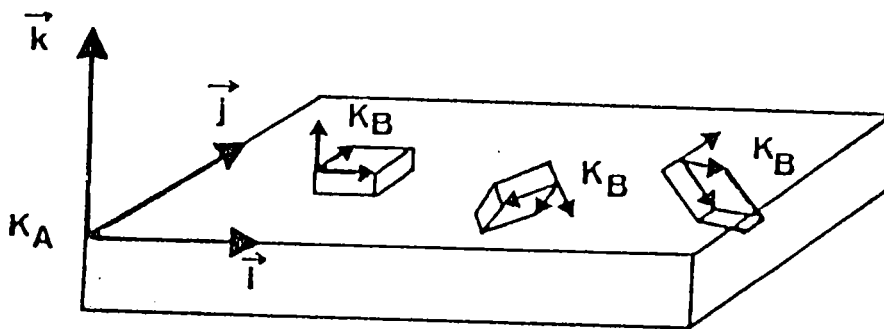


Fig. (2-5) : Représentation schématique de la disposition des cristallites dans l'échantillon.

2-3-a. Définition de la fonction de texture .

On appelle texture cristallographique d'un polycristal la statistique d'orientation des volumes cristallins individuels au sein de l'échantillon polycristallin. Elle est traditionnellement décrite par la Fonction de Densité des Orientations (F.D.O.) $f(g)$ [7-3] (appelée aussi fonction de texture). Cette fonction est définie sur le groupe continu des rotations $So(3)$, qui décrit de manière quantitative la texture cristallographique.

$$g \in So(3) \text{ -----} \rightarrow f(g) = \frac{1}{v} \frac{dv}{dg} \in \mathbb{R}^+ \quad (2-9)$$

dv/v représente la fraction de volume de cristallites dont

l'orientation est g à dg près [8].

$f(g)$ doit satisfaire aux deux conditions suivantes :

$$1^\circ) \quad f(g) \geq 0 \quad (2.10)$$

$$2^\circ) \quad \int_{\mathbf{g}} f(\mathbf{g}) d\mathbf{g} = 1 \quad (2.11)$$

$$\text{Avec} \quad d\mathbf{g} = \frac{1}{8\pi^2} \sin \phi \, d\phi_1 \, d\phi \, d\phi_2 \quad (2.12)$$

Un matériau à texture isotrope est caractérisé par une distribution uniforme et constante des orientations, de ce fait :

$$f(\mathbf{g}) = 1 \quad (2.13)$$

2.3-b Propriétés d'invariance de la fonction de texture :

Les propriétés de symétrie des cristaux imposent à la fonction de texture la condition d'invariance suivante :

$$f(\mathbf{g}) = f(\text{Sig}) \quad (2.14)$$

Car g et Sig sont des rotations qui désignent la même orientation (Si : étant un élément du groupe de symétrie rotationnelle du cristal).

Lorsque le repère de l'échantillon peut être choisi de façon multiple par une opération de symétrie σ , où σ est un élément du groupe de symétrie rotationnelle de l'échantillon, une deuxième condition d'invariance apparaît :

$$f(\mathbf{g}) = f(\mathbf{g}\sigma) \quad (2.15)$$

Cette double relation d'invariance s'exprime par :

$$f(g) = f(\text{Sig}\sigma) \quad (2-16)$$

En raison de la symétrie du réseau et de l'échantillon, une orientation $\{g\}$ est définie par la famille des rotations $\{\text{Sig}\sigma\}$. Il n'est donc plus nécessaire de calculer la fonction de texture dans tout l'espace d'Euler, mais on peut limiter ce calcul à un domaine restreint appelé domaine fondamental où l'orientation est définie par une seule rotation g et à partir duquel il est possible de restituer cette fonction pour tout l'espace [9-10].

La suite définit le domaine fondamental dans le cas d'une présence simultanée de la symétrie hexagonale pour le cristallite et de la symétrie orthorhombique pour l'échantillon.

Cas de la symétrie hexagonale :

L'axe c d'ordre 6 (figure (2-6)) du cristallite impose à la fonction de texture d'être invariante pour les rotations [6] :

$$(\varphi_1, \phi, \varphi_2 + 2K\pi/6) \quad K=0, 1, \dots, 5. \quad (2-17)$$

On voit donc que la rotation de φ_2 est limitée au domaine :

$$0 \leq \varphi_2 \leq 2\pi/6 \quad (2-18)$$

L'axe binaire $Y = a_2$ du cristallite donne aussi une invariance pour les rotations :

$$\begin{aligned} &(\varphi_1, \phi, \varphi_2) \\ &(\varphi_1 + \pi, \pi - \phi, 2\pi - \varphi_2) \end{aligned} \quad (2-19)$$

En composant les rotations, la fonction de texture doit être invariante pour les rotations suivantes :

$$\begin{aligned} &(\varphi_1, \phi, \varphi_2 + 2K\pi/6) \\ &(\varphi_1 + \pi, \pi - \phi, 2\pi - (\varphi_2 + 2K\pi/6)) \quad K=0,1,\dots,5 \end{aligned} \quad (2-20)$$

La figure (2-8) montre en projection dans le plan $\varphi_2=0$, 2 rotations équivalentes dans l'espace d'Euler limitée par $\varphi_2 < \pi/3$.

Cas de la symétrie orthorhombique

Dans le cas du laminage, la symétrie de l'échantillon est la symétrie orthorhombique : 222. fig.(2-7)

Cette symétrie impose à la fonction de texture une invariance pour les rotations suivantes :

$$(\varphi_1, \phi, \varphi_2) \equiv (\pi + \varphi_1, \phi, \varphi_2) \equiv (2\pi - \varphi_1, \pi - \phi, \varphi_2) \equiv (\pi - \varphi_1, \pi, \varphi_2) \quad (2-21)$$

En combinant les rotations obtenues pour les deux symétries, on obtient les 48 rotations Sigœ équivalentes par symétries qui sont paramétrées par les angles d'Euler suivants :

$$\begin{array}{ll} [\varphi_1, \phi, \varphi_2 + 2\pi K/6] & [\varphi_1, \pi - \phi, 2\pi - 2\pi K/6 - \varphi_2] \\ [\varphi_1 + \pi, \phi, \varphi_2 + 2\pi K/6] & [\varphi_1 + \pi, \pi - \phi, 2\pi - 2\pi K/6 - \varphi_2] \\ [\pi - \varphi_1, \phi, \pi - 2\pi K/6 - \varphi_2] & [\pi - \varphi_1, \pi - \phi, \varphi_2 + \pi + 2\pi K/6] \\ [2\pi - \varphi_1, \phi, \pi - 2\pi K/6 - \varphi_2] & [2\pi - \varphi_1, \pi - \phi, \varphi_2 + \pi + 2\pi K/6] \end{array}$$

K=0,1,...,5.

(2-22)

L'étude de ces relations fait apparaître les limites du domaine fondamental:

$$\begin{array}{l} 0 \leq \varphi_1 \leq \pi/2 \\ 0 \leq \phi \leq \pi/2 \\ 0 < \varphi_2 \leq \pi/3 \end{array} \quad (2.23)$$

La figure (2-9) montre en projection dans le plan $\varphi_2=0$, les rotations équivalentes pour les deux symétries et fait apparaître le domaine fondamental.

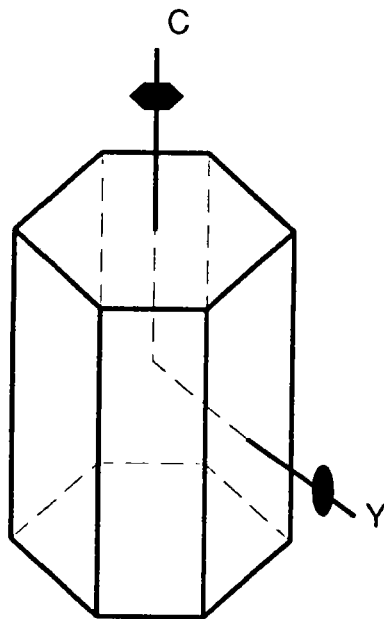


Fig. 2-6 : Orientation de l'axe c et de l'axe Y dans la maille hexagonale

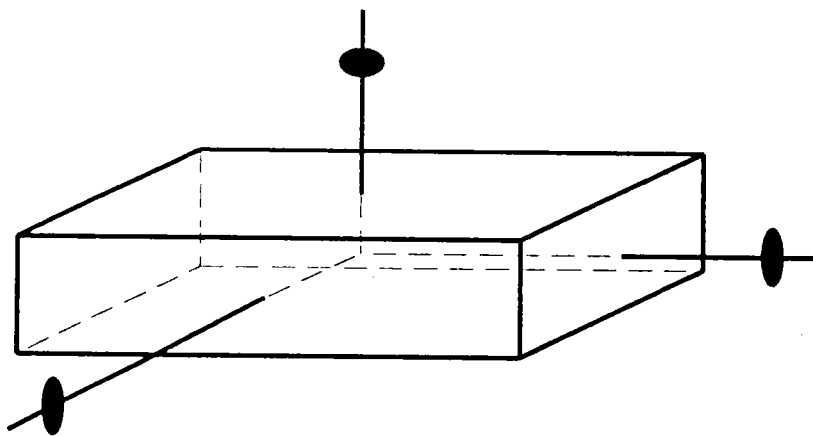


Fig. 2-7 : Orientation des axes d'ordre 2 dans l'échantillon

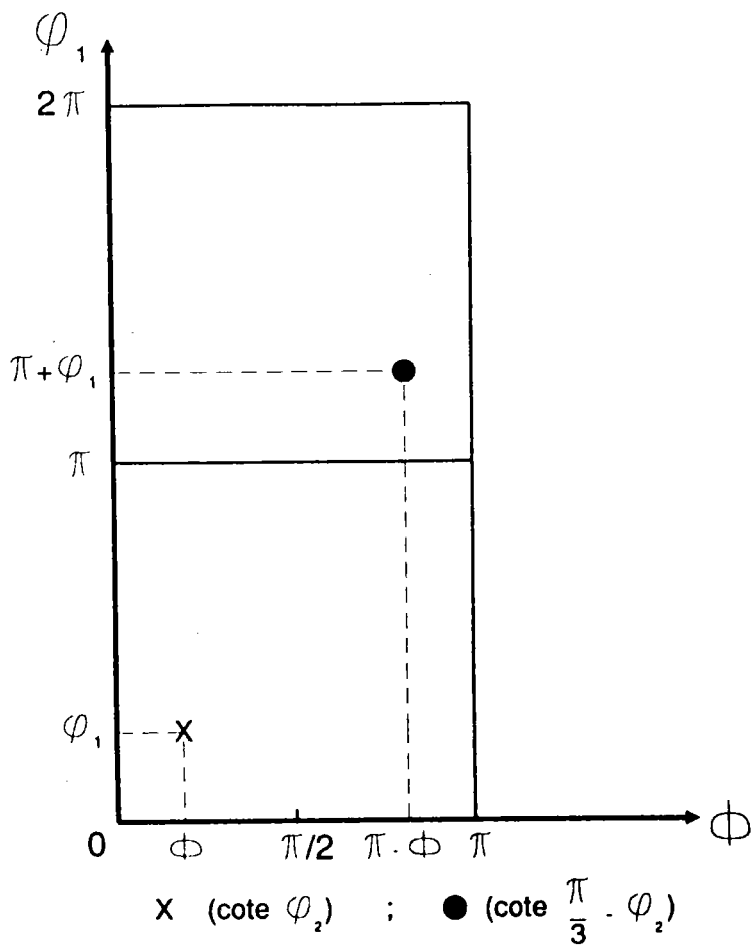


Fig. 2-8 : Deux rotations équivalentes dans l'espace d'Euler pour la symétrie du cristallite.

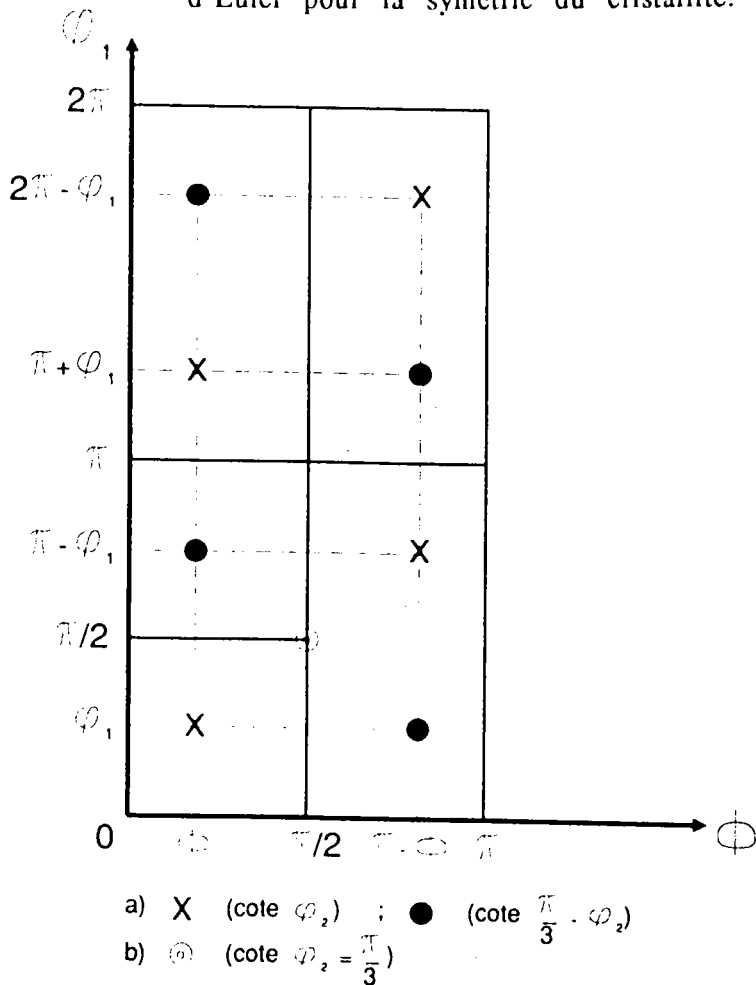


Fig. 2-9 : a) les rotations équivalentes dans l'espace d'Euler pour les deux symétries b) Apparition du domaine fondamental

2-3-c Représentation de la fonction de texture.

On peut déterminer la fonction de densité des orientations à partir de figures de pôles expérimentales par différentes méthodes (la méthode d'itération de WILLIAMS [11,12], ou la méthode vectorielle de RUER, BARO et VADON [13,14], ou la méthode de ROE [15], ou la méthode de BUNGE [2,16], ou la méthode de WIMV [17], ou les méthodes de l'entropie [18,19]).

Dans le cadre de ce travail, nous avons calculé la F.D.O. selon la méthode développée par BUNGE où la F.D.O. est représentée par un développement en série de fonctions harmoniques sphériques généralisées.

Cette représentation est particulièrement commode pour étudier les propriétés d'invariance de la F.D.O. qui résultent des symétries du cristal et de l'échantillon [8].

$$f(g) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{n=-l}^{+l} \sum_{m=-l}^{+l} C_l^{mn} T_l^{mn}(g) \quad (2-24)$$

où :

- les coefficients C_l^{mn} caractérisent la texture et apparaissent dans le calcul des propriétés physiques anisotropes [3-4].

La série est en général tronquée à un rang maximal L_{\max} choisi en accord avec l'acuité de la texture. La F.D.O. est alors caractérisée par un nombre

limité de coefficients de texture C_l^{mn} :

$$\{C_l^{mn}\} \text{ avec } l : -l \leq m, n \leq +l \quad (2.25)$$

- les fonctions $T_l^{mn}(g)$ sont des fonctions harmoniques sphériques généralisées qui constituent une base orthonormée et complète [20].

Avec

$$T_l^{mn}(g) = e^{in\phi_1} P_l^{mn}(\phi) e^{im\phi_2} \quad (2-26)$$

$P_l^{mn}(\phi)$ est un polynôme associé au polynôme de JACOBI [7,21].

On peut calculer les coefficients de texture C_l^{mn} en mettant à profit les propriétés d'orthogonalité des fonctions harmoniques sphériques généralisées, d'où l'on déduit de l'expression (2.24) :

$$C_l^{mn} = (2l+1) \int f(g) T_l^{mn*}(g) dg \quad (2-27)$$

où le symbole * dénote la conjugaison complexe.

Si l'on arrête la série (2.24) à une valeur finie de L_{max} , on obtient une représentation approchée de la texture.

Les coefficients C_l^{mn} correspondants peuvent être calculés :

- soit directement à partir des orientations individuelles d'un grand nombre de grains [23].
- soit à partir de quelques fonctions de densité de pôles (improprement appelées figures de pôles) [7,24], ce qui est le cas le plus aisé et le plus fréquemment utilisé au laboratoire.

2-4 DENSITE DE POLES - FIGURES DE POLES

2-4-a Pôle.

Si une famille de plans $\{hkl\}$ d'un cristallite est placée au centre 0 d'une sphère imaginaire de rayon unité, la normale à cette famille de plans $\{hkl\}$ passant par le point 0 coupe la sphère au point P (figure 2-10).

Le point P est appelé pôle de la famille de plans $\{hkl\}$. Il existe une relation biunivoque entre les pôles et les plans $\{hkl\}$ de l'échantillon [25].

2-4-b- Densité de pôles.

La densité de pôles (hkl) $P_{(hkl)}(\vec{y})$ représente la fraction volumique des cristallites qui pointent une direction \vec{h} dans une direction \vec{y} du repère macroscopique à $d\vec{y}$ près (fig. 2-11).

$$P_{\vec{h}}(\vec{y}) d\vec{y} = 4 \pi \frac{dv}{v} \quad (2-28)$$

dv/v représente la fraction volumique des cristallites ayant une direction \vec{h} parallèle à une direction \vec{y} de l'échantillon.

2-4-c Projection stéréographique.

Dans la pratique on représente la fonction de densité de pôles en projection stéréographique qui présente l'avantage de conserver les angles, d'étudier la désorientation entre deux grains et de mettre en évidence une relation de macle, ou bien d'orienter un grain d'après des traces de lignes de glissement ou d'après la forme de figure de corrosion [26].

La figure de pôle est la représentation stéréographique (figure (2-12)) de la répartition des normales à un ensemble de plans réticulaires {hkl} dans tous les grains de l'échantillon, ainsi au point P de la figure (2-10) on fait correspondre le point Pr qui est l'intersection de la droite joignant le point P au pôle S avec le plan équatorial Π (choisi comme plan de projection). Si l'on recommence avec tous les éléments de volume du polycristal, on obtient la figure de pôles {hkl} qui est rapportée à des axes liés à l'échantillon : le plan équatorial de projection Π est pour un fil un plan perpendiculaire à son axe, pour une tôle le plan de la tôle [1].

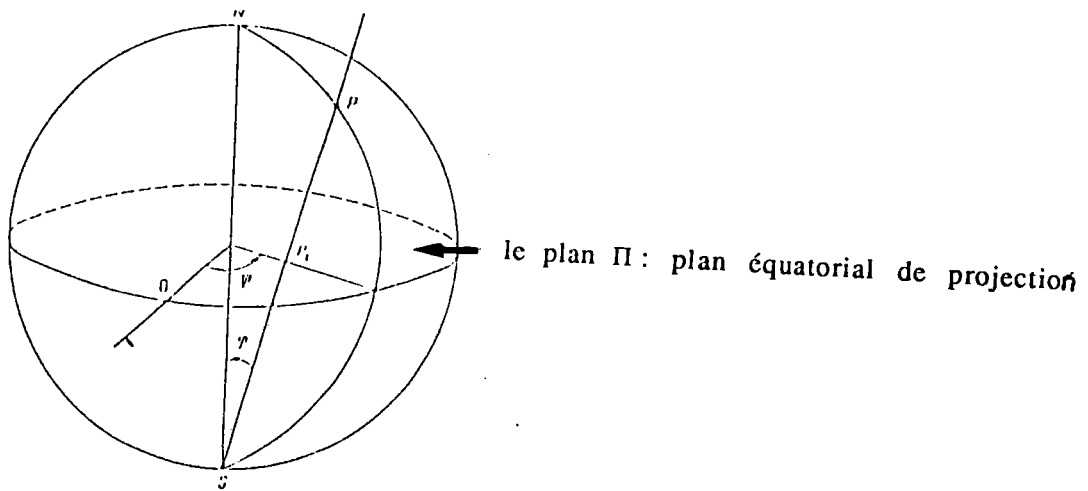


Fig. (2-10) : Pr projection stéréographique du point P.

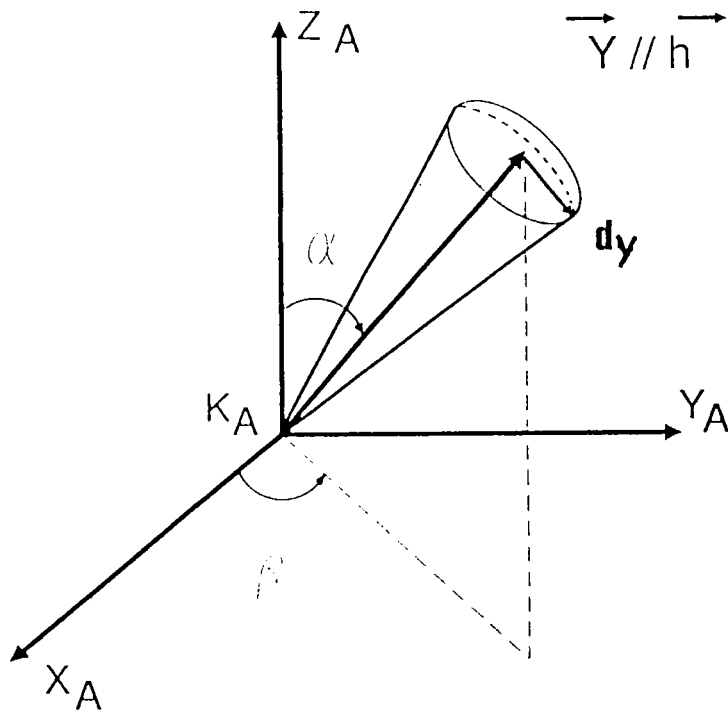


Fig. (2-11) : Y une direction fixée de l'échantillon, parallèle aux directions \vec{h} du cristallite.

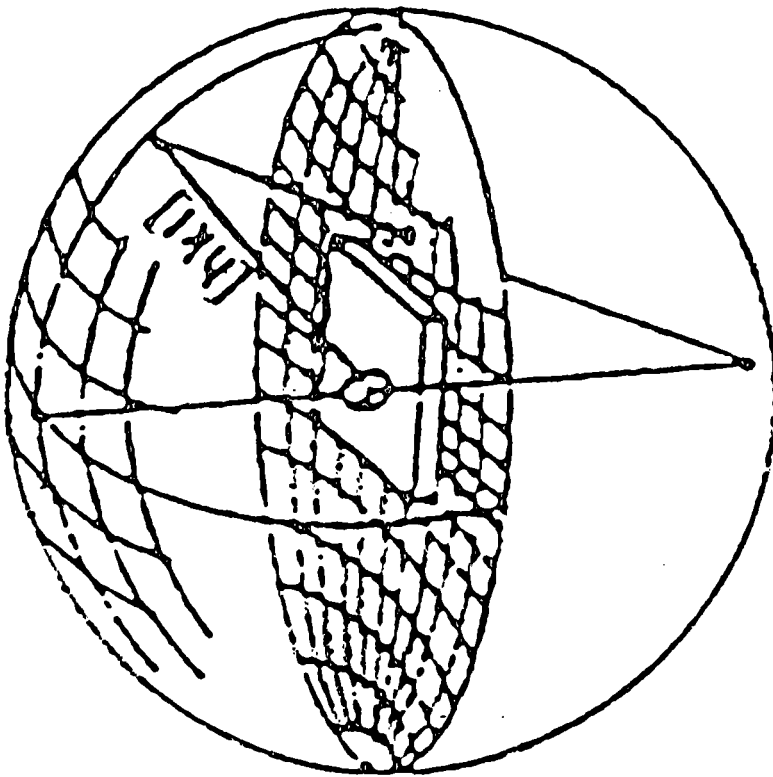
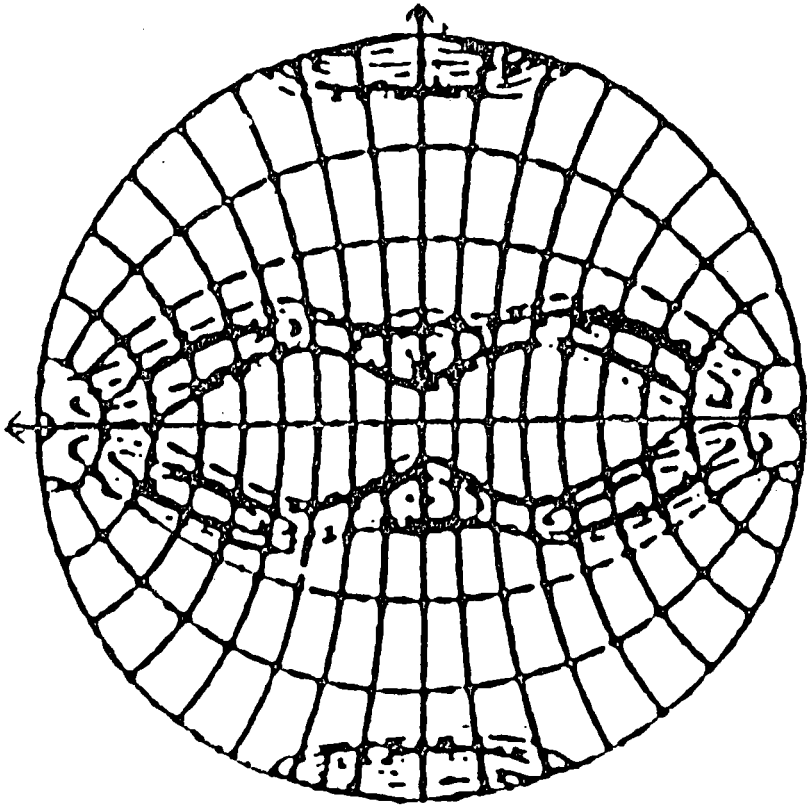


Fig. (2-12) : Définition de la figure de pôle (hkl) [4].

2-4-d Développement en série de la fonction densité de pôles $P_h(y)$

Une fonction définie sur la surface d'une sphère comme c'est le cas pour la fonction de densité de pôles peut être développée en série d'harmoniques sphériques de surface [20] :

$$P_h(y) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{n=-l}^{+l} F_l^n(h) K_l^n(y) \quad (2-29)$$

On peut calculer les coefficients $F_l^n(h)$ en mettant à profit les propriétés d'orthogonalité des fonctions harmoniques sphériques de surface $K_l^n(y)$.

On obtient :

$$F_l^n(h) = \oint P_h(y) K_l^{*n}(y) dy \quad (2-30)$$

La relation entre la fonction de densité de pôles $P_h(\vec{y})$ et la fonction de texture $f(g)$ s'exprime de la manière suivante :

$$P_h(\vec{y}) = \frac{1}{2\pi} \int_{gh=y} f(g) dg \quad (2-31)$$

En remplaçant dans cette relation chacune des fonctions par son développement en série et compte tenu des propriétés des fonctions harmoniques sphériques de surface et généralisées on obtient le système d'équations suivants :

$$F_l^n(h) = \frac{4\pi}{2l+1} \sum_{m=-l}^{+l} C_l^{mn} K_l^{*m}(h) (-1)^n \quad (2-32)?$$

qui relie les coefficients de figures de pôles $F_l^n(h)$ au coefficient de texture C_l^{mn} . C'est ce système d'équations que l'on utilise pour déterminer

les coefficients C_l^{mn} de la fonction de texture à partir du développement en série des fonctions de densité de pôles.

2-4-e Développement en série de la fonction de densité de pôles inverse $R_y(h)$

Une autre notion utile en analyse des Textures est la notion de figure de pôles inverse $R_y(h)$. Cette fonction représente la fraction volumique du polycristal pour laquelle la direction macroscopique \vec{y} coïncide avec un pôle \vec{h} à $d\vec{h}$ près.

$$\frac{dv}{v} = 4 \pi R_y(h) d\vec{h} \quad (2-33)$$

La fonction $R_y(h)$ peut elle aussi se développer sur la base des harmoniques sphériques de surface :

$$R_y(h) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{n=-l}^{+l} H_l^m(y) K_l^m(h) \quad (2-34)$$

On peut calculer les coefficients $H_l^m(y)$ en mettant à profit les propriétés d'orthogonalité des fonctions harmoniques sphériques de surface $K_l^m(h)$.

On obtient :

$$H_l^m(y) = \oint R_y(h) K_l^m(h) dh \quad (2-35)$$

2-5- DEFINITION DE LA FONCTION DE DISTRIBUTION BIAZIALE

La fonction de densité biaxiale $A(\vec{h}, \vec{y})$ est la probabilité de coïncidence des directions cristallines \vec{h} paramétrée par les angles θ, γ dans le référentiel K_B lié au cristal fig.(2-3-a) avec les directions

d'échantillon \vec{y} paramétrées par les angles α, β dans le référentiel K_A lié à l'échantillon fig.(2-3-b).

$A(\vec{h}, \vec{y})$ est lié à la F.D.O. par une équation intégrale [3 - 4] :

$$A(\vec{h}, \vec{y}) = \frac{1}{2\pi} \int_{h=gy} f(g) dg \quad (2-36)$$

Cette dernière équation relie les informations $A(h,y)$ recueillies expérimentalement (et contenant les données physiques du problème) à la fonction $f(g)$ que nous nous sommes définies mathématiquement de manière à pouvoir décrire quantitativement la texture d'un échantillon.

Cette relation impose par conséquent que la F.D.O. possède toutes les caractéristiques (physiques) incluses dans les figures de pôles, c'est à dire les symétries de la loi de diffraction cristallographique, ainsi que les propriétés de symétries pouvant exister dans le cristal et dans le polycristal [27].

Dans la définition traditionnelle de la F.D.O., sur le groupe continu des rotations $So(3)$, l'intégrale (2-36) est une intégrale curviligne [7,3,4] effectuée sur une trajectoire appelée fil, selon la terminologie de MATTHIES [28] - d'amplitude 2π et qui se referme sur elle-même, en boucle [8].

Il est aisé de calculer l'intégrale équation (2-36), ce qui conduit à l'expression de $A(\vec{h}, \vec{y})$ en fonction des coefficients de texture C_l^{mn} [23] (voir annexe I) :

$$A(h,y) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{+l} \sum_{n=-l}^{+l} \frac{4\pi}{2l+1} C_l^{mn} K_l^{*m}(h) K_l^n(y) \quad (2.37)$$

où $K_l^{*m}(h)$ et $K_l^n(y)$ sont des fonctions harmoniques sphériques de surface.

L'équation (2.37) montre que les coefficients de texture C_l^{mn} ne caractérisent pas uniquement la F.D.O., mais aussi la fonction de densité axiale $A(\vec{h}, \vec{y})$

En fait, la fonction de densité biaxiale livre comme cas particulier la fonction densité de pôles directe $P_h(y)$ lorsque une direction cristalline

particulière \vec{h} est fixée et la fonction densité de pôles inverse $R_{\vec{y}}(\vec{h})$ en fixant une direction d'échantillon particulière \vec{y} .

La figure(2-13) résume les propriétés de $A(\vec{h}, \vec{y})$.

$$A(\vec{h}, \vec{y}) \text{ devient : } \begin{array}{l} P_{\vec{h}}(\vec{y}) \text{ si } \vec{h} \text{ fixée : figure de pôle directe} \\ R_{\vec{y}}(\vec{h}) \text{ si } \vec{y} \text{ fixée : figure de pôle inverse} \end{array} \quad (2-38)$$

2-6 EFFET DES SYMETRIES SUR LE CALCUL DE LA F.D.O. et $P_{\vec{h}}(\vec{y})$

2-6-a : Effet des symétries sur le calcul de la F.D.O.

On a vu que si l'on a simultanément une symétrie cristalline et une symétrie d'échantillon la fonction de texture $f(g)$ doit satisfaire à la relation d'invariance (2.16) ; la présence d'une symétrie diminue le nombre de coefficients C_1^{mn} dans le développement en série de $f(g)$ et dans ce cas on utilise des fonctions harmoniques sphériques généralisées, doublement symétrisées, notées $\overset{\cdot\cdot}{T}_l^{\mu\nu}(g)$, pour le développement de $f(g)$.

Ces fonctions doublement symétrisées, $\overset{\cdot\cdot}{T}_l^{\mu\nu}(g)$, sont des combinaisons linéaires des fonctions harmoniques sphériques généralisées, $T_l^{mn}(g)$.

La série de la F.D.O. tronquée à un rang maximal L_{Max} , devient dans ce cas :

$$f(g) = \sum_{l=0}^{L_{max}} \sum_{\mu=1}^{M(l)} \sum_{\nu=1}^{N(l)} C_1^{\mu\nu} \overset{\cdot\cdot}{T}_l^{\mu\nu}(g) \quad (2-39)$$

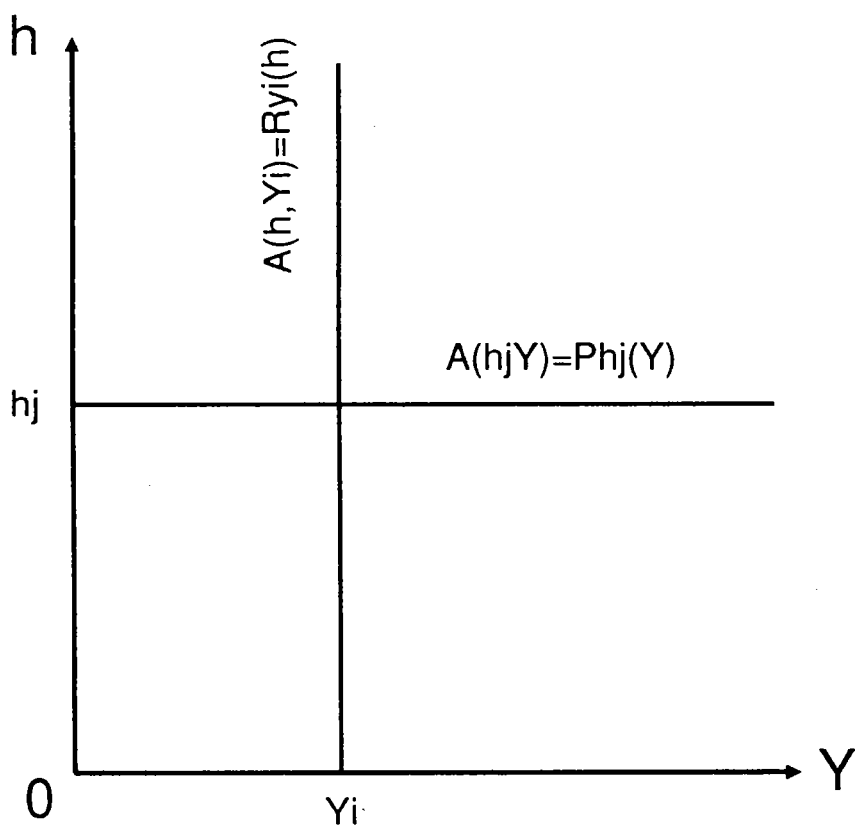


Fig. (2-13) : Relation entre $A(h, Y)$, $R_{Y_i}(h)$ et $P_{h_j}(Y)$.

2-6-b Effet de symétries sur le calcul de $P_h(y)$

En prenant en compte l'effet de la symétrie d'échantillon, on peut ne plus développer $P_h(y)$ sur les fonctions harmoniques de surface

habituelles $K_l^n(y)$, mais sur des fonctions harmoniques sphériques de surface préalablement symétrisées que nous notons $\dot{K}_l^v(y)$ qui sont des combinaisons linéaires simples des fonctions harmoniques sphériques de surface $K_l^n(y)$.

En tronquant la série (2.29) à une valeur L_{max} , on aura dans ce cas :

$$P_h(y) = \sum_{l=0(2)}^{L_{max}} \sum_{v=1}^{N(l)} F_l^v(h) \dot{K}_l^v(y) \quad (2-40)$$

où $N(l)$ dépend de la symétrie d'échantillon considéré.

En prenant en compte la symétrie cristalline, l'expression (2-32) devient :

$$F_l^v(y) = \frac{4\pi}{2l+1} \sum_{\mu=1}^{\mu=M(l)} C_l^{\mu v} \dot{K}_l^{\mu}(h) \quad (2-41)$$

où $\dot{K}_l^{\mu}(h)$ est une fonction harmonique sphérique de surface, symétrisée pour la symétrie cristalline et $M(l)$ dépend de la symétrie du cristal considéré.

Les coefficients $F_l^v(h)$ de l'équation (2-41) sont calculés à partir des figures

de pôle expérimentales et les coefficients $C_l^{\mu v}$ sont des inconnues que l'on détermine en résolvant le système d'équations de la façon suivante :

Si l'on fixe un couple (l, v) une équation du type (2-41) contient $M(l)$

inconnues (les coefficients $C_l^{\mu v}$ pour μ variant de 1 à $M(l)$).

Il faut donc au moins $M(l)$ équations pour déterminer ces inconnues. Ces $M(l)$ équations sont obtenues en considérant $M(l)$ figures de pôles distincts.

Si l'on désire déterminer les coefficients pairs $C_l^{\mu\nu}$ jusqu'à un rang $L=L_{\max}$, on doit donc disposer de $M(l_{\max})$ figures de pôles. C'est donc la symétrie cristalline et elle seule qui détermine le nombre de figures de pôles nécessaires pour calculer les coefficients $C_l^{\mu\nu}$ de la fonction de texture jusqu'à une valeur $l=L_{\max}$ fixée

La figure 2-14 montre les courbes $M(l)$ en fonction de l pour deux symétries cristallines, l'une cubique et l'autre hexagonale.

2-7 CONCEPTION DES PROGRAMMES [10]

La figure (2-15) indique l'articulation des différents programmes utilisés dans l'analyse tridimensionnelle des textures.

Compte tenu du fait qu'il faut générer un très grand nombre de fois les fonctions harmoniques sphériques de surface et généralisées, on peut constituer des bibliothèques numériques dans lesquelles on range les valeurs de fonctions sur des grilles standard. Le programme de détermination des coefficients de texture $C_l^{\mu\nu}$ est le programme dit

d'analyse. A partir de ces coefficients $C_l^{\mu\nu}$ qui définissent la partie paire des coefficients de la texture, on peut calculer la valeur de la fonction de texture $f(g)$ pour différentes sections de l'espace d'Euler par un programme dit de synthèse. La connaissance des coefficients de Texture $C_l^{\mu\nu}$ permet aussi le calcul de toute figure de pôles, directe ou inverse, souhaitée ainsi que le calcul de certaines propriétés physiques anisotropes.

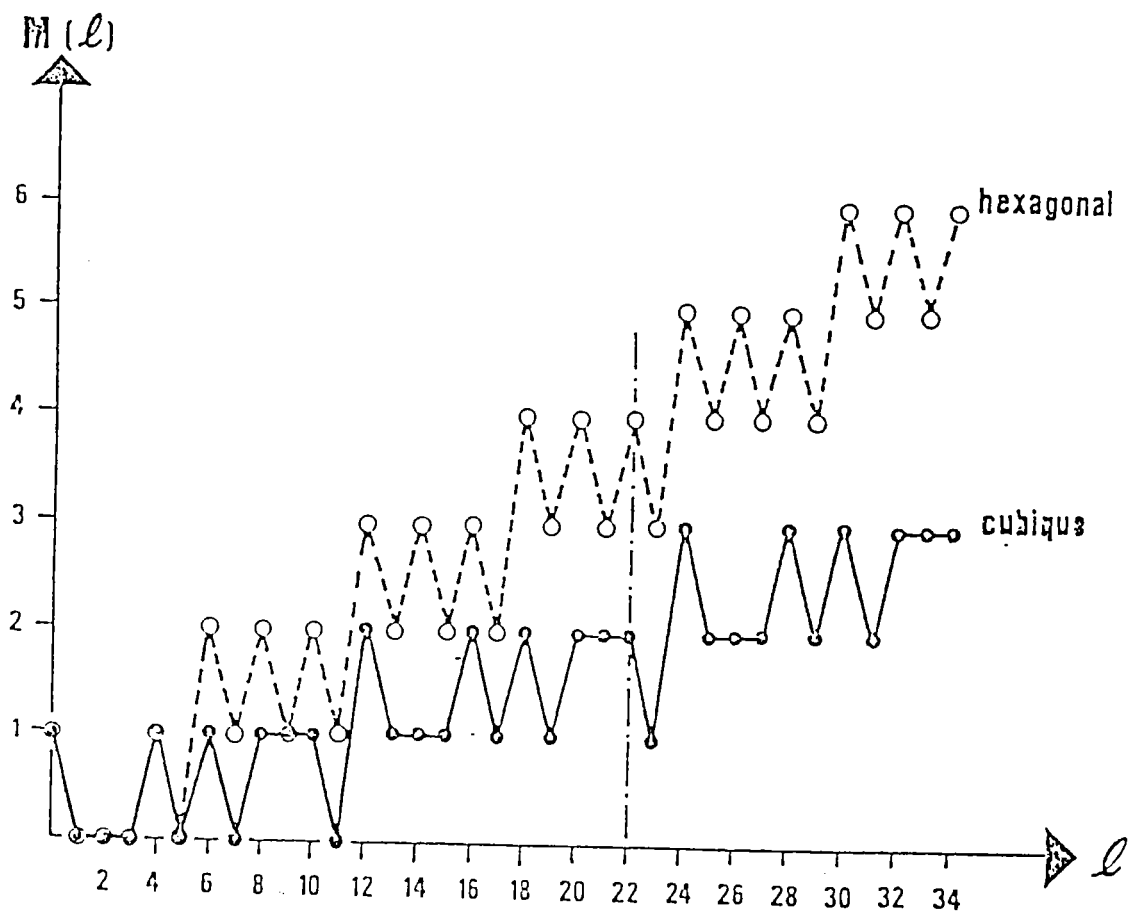


Fig. (2-14) : Nombre de figures de pôles nécessaire, $M(l)$, pour une analyse de texture en fonction du rang du développement l .

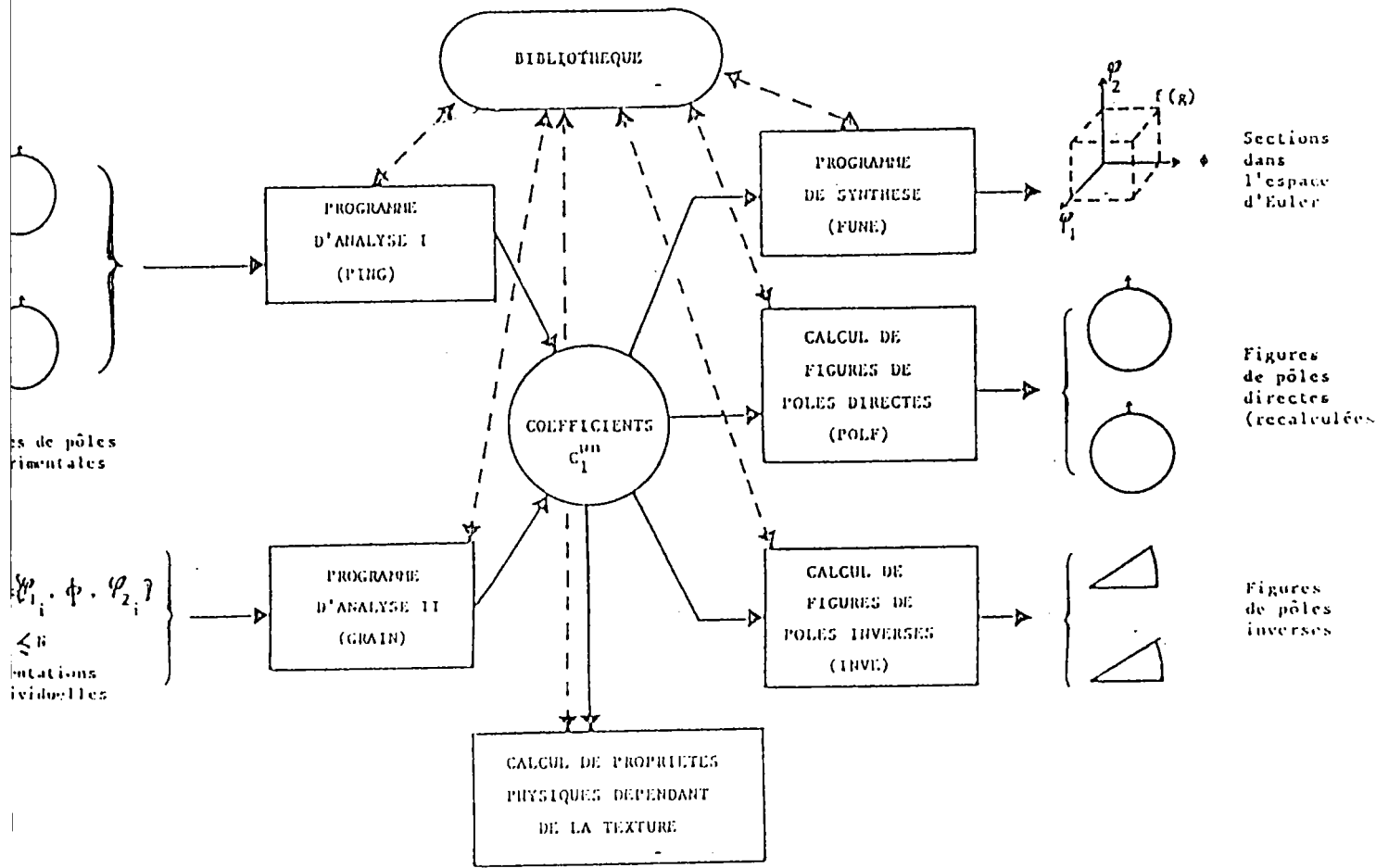


Fig. (2-15) : Schéma général des programmes utilisés dans l'analyse des textures et définition de leurs rôles.

2-8 DETERMINATION DES FIGURES DE POLES

Les figures de pôles qui permettent de déterminer l'O.D.F. sont en général obtenues par diffraction des rayons X ou des neutrons à l'aide d'un goniomètre de texture [29-30]. Parmi les méthodes employées pour la détermination des figures de pôles, la méthode de Schulz jouit d'une grande faveur [31-32]. Dans notre travail, on a mesuré uniquement des figures de pôles directes par diffraction de rayons X grâce à un goniomètre de texture piloté par un ordinateur et conçu au laboratoire [33] (fig. 2-16)).

Principe de la méthode de Schulz en réflexion :

Le principe de la méthode de Schulz en réflexion est représenté par la figure (2-17) [33]

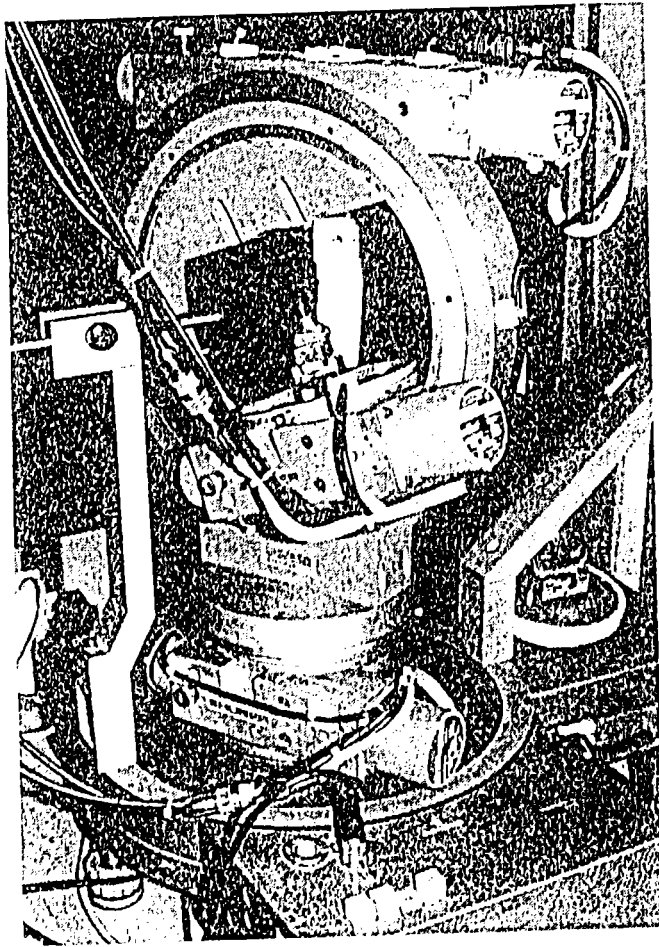
L'échantillon polycristallin subit deux rotations par rapport au système fixe source-détecteur (figure (2-17)). Pour une orientation donnée du polycristal, les plans réticulaires dont les normales \vec{h} sont parallèles au vecteur de diffraction \vec{s} dont l'orientation est \vec{y} dans le repère K_A lié à l'échantillon, participent à la diffraction. La surface de l'échantillon est choisie comme un plan équatorial de la sphère des pôles. L'angle θ_h compris entre les faisceaux de rayons X incidents et les plans {hkl} considérés est fixé par la loi de Bragg :

$$n\lambda = 2 d_h \sin \theta_h \quad (2-42)$$

où d_h est la distance interréticulaire des plans {hkl} de normale \vec{h} .

La composition des deux rotations (ψ : azimutale et ϕ : la déclinaison) permet de donner à l'échantillon une succession d'orientations et de déterminer ainsi les pôles de la famille des plans réticulaires {hkl} contenus dans l'échantillon.

Pour une orientation fixée de l'échantillon le nombre de photons X recueillis par le compteur est lié à la densité de plans réticulaires en positions de diffraction [34]. La défocalisation correspond à une chute de l'intensité mesurée, due à une variation de la géométrie du faisceau diffracté, et dépend étroitement de la valeur des angles de Bragg utilisés [34] et des fentes de réglage du compteur. En conséquence, les intensités recueillies doivent être préalablement corrigées des effets perturbateurs de la défocalisation. Il est par ailleurs nécessaire de corriger ces intensités du bruit de fond et quelquefois des effets d'absorption.



*a) Photographie du goniomètre monté
avec tête goniométrique.*

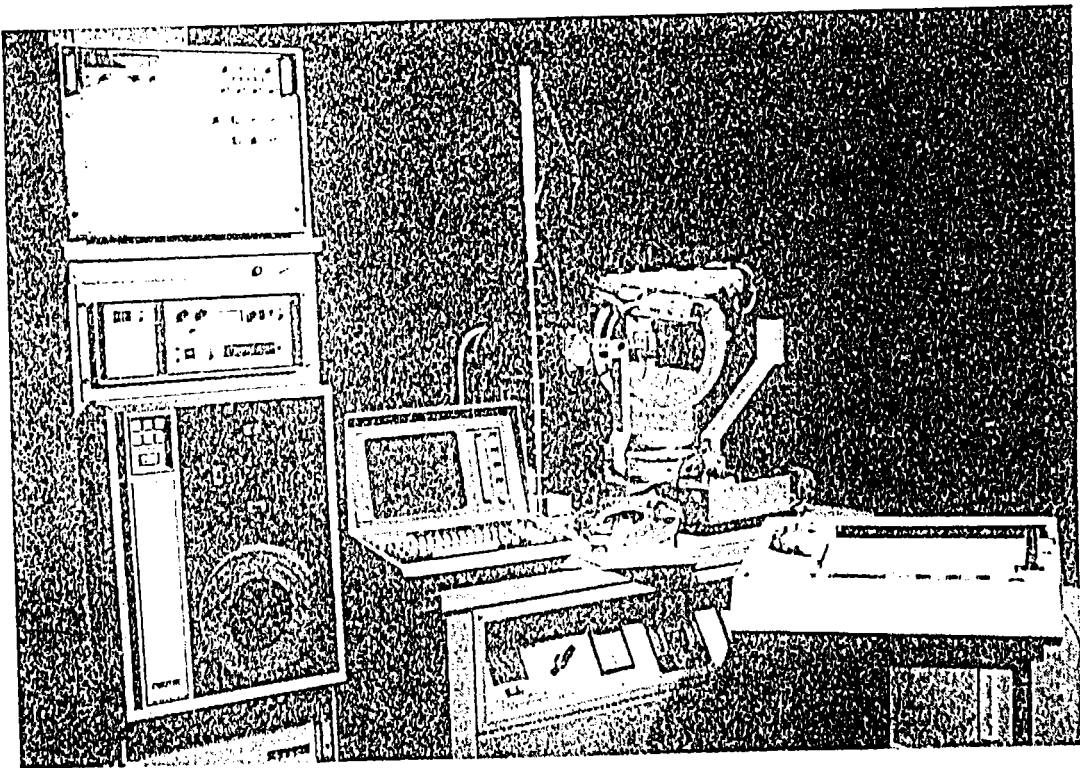


Fig. (2-16) : Vue générale de l'installation

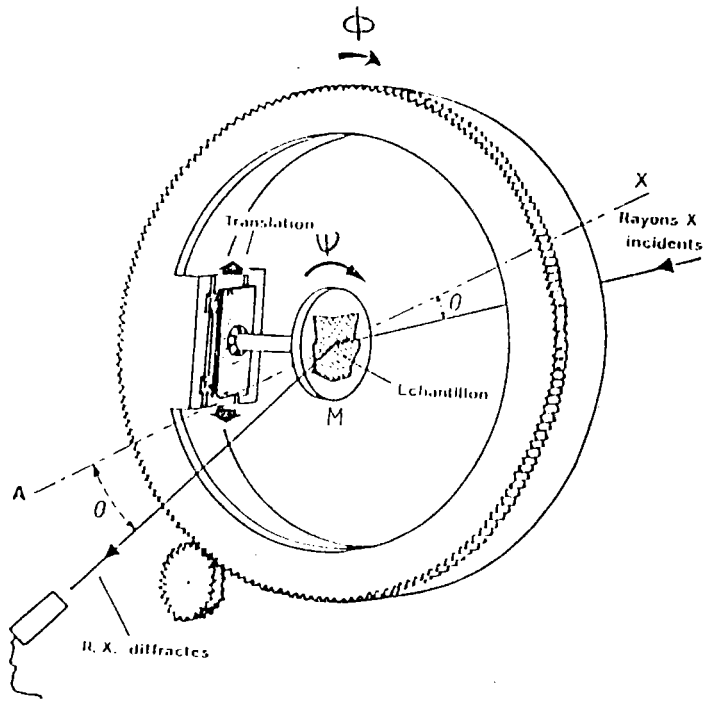


Fig. (2-17) : Principe du goniomètre de texture.

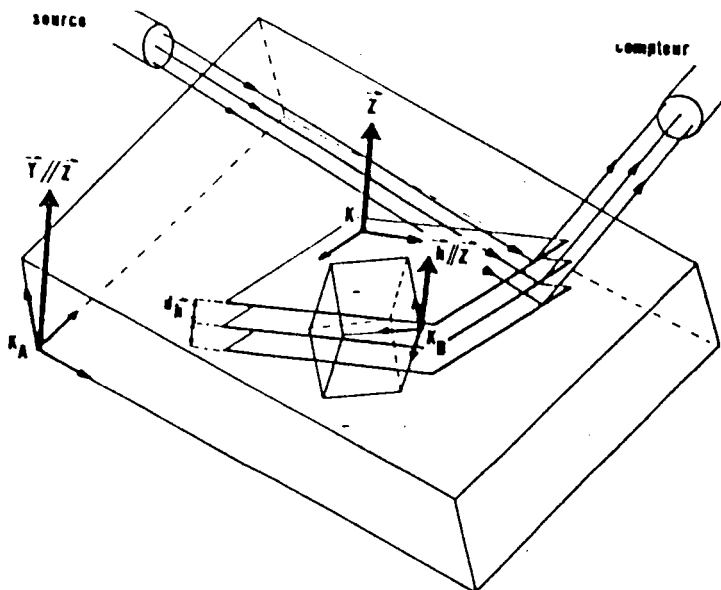


Fig. 2-18: Les plans cristallographiques d_h sélectionnés par l'angle de Bragg θ_h diffractent lorsque leur normale \vec{z} est parallèle au vecteur de diffraction

2-9 CONCLUSION :

a) Nous avons décrit dans le chapitre 2 les quelques aspects mathématiques du développement en série de la fonction de densité de pôles $P_{\vec{h}}(\vec{y})$, de la fonction biaxiale $A(\vec{h}, \vec{y})$ et de la F.D.O.

b) La fonction de densité des orientations F.D.O. et la fonction biaxiale sont utilisées dans le calcul des propriétés physiques anisotropes du polycristal comme nous le montrons dans le chapitre 3.

c) Bien sûr, le calcul prévisionnel des propriétés physiques dépend de la précision de détermination de la F.D.O. à partir des figures de pôles expérimentales. Il convient de trouver les meilleurs compromis de réglage du goniomètre de texture afin de minimiser les erreurs systématiques et statistiques en vue de réduire les corrections des valeurs expérimentales.

REFERENCES DU DEUXIEME CHAPITRE

- [1] P. COULOMB "Les Textures dans les métaux de réseau cubique" Dunod (1972)
- [2] H.J. BUNGE "Metallkunde" 56 p 872 (1965)
- [3] H.J. BUNGE "Texture Analysis in Material science-Mathematical Methods" (Butterworth, London) 1983.
- [4] H.J. BUNGE and C. ESLING "Quantitative Texture Analysis" DEUTSCHE GESELLSCHAFT FÜR METALLKUNDE E.V. Société Française de Métallurgie.
- [5] M. HUMBERT, Thèse d'Etat Université de Metz 1987
- [6] R. KOUDANE "Rapport de Stage du D.E.A" de G.P.M. Université de Metz 1987/88.
- [7] H.J. BUNGE "Mathematische Methoden der Textur-analyse" Akademie - Verlag Berlin (1969).
- [8] C. ESLING, Thèse d'Etat, Université de Metz 1981.
- [9] POSPIECH, A. GNATEK and K. FICHTNER . "Kristal und Technik" 9, p. 729 (1974).
- [10] F. WAGNER, Thèse d'Etat, Université de Metz, 1983.
- [11] R.O. WILLIAMS, J. Appl. phys. 39 (1968) 4329.
- [12] R.O. WILLIAMS, Trans. AIME, 242(1968) 105.
- [13] D. RUER, Thèse d'Etat, Université de Metz, 1976.
- [14] D.RUER, A.VADON and R. BARO "Advance in X-Ray Analysis" (1979) 349.
- [15] R.J. ROE, J. Appl. Phys. 36 (1965) 2024.

- [16] H.J. BUNGE, Thèse, Université Humboldt, Berlin (1963)
- [17] S. MATTHIES, G.W. VINEL ,and K.HELMING "Standard distributions in Texture Analysis" Akademie Verlag,Berlin 1987.
- [18] H. SCHAEBEN, "Entropy optimization in Texture goniometry I" Methodology. phys. Stat. sol. (b), 148, 63-72.1988.
- [19] H. SCHAEBEN, H. SIEMS, S. AUERBACH "Entropy optimization in Texture goniometry II" Practical applications : phys. stat. sol. (b) - 1989.
- [20] D.M. BRINK and G.R SATCHLER "Angular Momentum", Clarendon Press, Oxford (1968).
- [21] W.W. BELL "Fonctions spéciales à l'usage des chercheurs et ingénieurs" Dunod, Paris, 1971.
- [22] H.J. BUNGE et J. EHLERT, Monatsberichte der Deutschen Akademie der Wissenschaften, Berlin, 8 (1966) ; p.241.
- [23] F. HAESSNER, V. JAKUBOWSKI und WILKENS, Phys. Stat. sol. 7 p. 101 (1964)
- [24] J. POSPIETCH et J. JURA "Z. Metallkunde" 65, p.324 (1974).
- [25] M. HUMBERT, Thèse de 3ème cycle, Université de Nancy I, 1976.
- [26] C.S. BARETT, Transaction, AIME, 124 (1937), p. 29, "Structure des métaux" Dunod (1957).
- [27] P. DERVIN, Thèse de docteur, ingénieur, Université de Paris-Sud, Centre d'Orsay, 1978.
- [28] S. MATTHIES, "Kristall und Technik" 15 (1980) 431.
- [29] C.S. BARRETT and T.B. MASSALSKI "Structure of metals" Mc Graw Hill (1966).

- [30] G. WASSERMANN und J. GREWEN, Texturen Metallischer Werkstoffe Springer Verlag (1962).
- [31] L.G. SCHULZ, J. Appl. phys., 20, p.1030, (1949).
- [32] L.G. SCHULZ, J. Appl, phys. 20 p. 1033, (1949).
- [33] D. RUER "Methodes de réalisation et d'interprétation des figures de pôles directes" Thèse 3ème cycle. Université de Metz. (1971)
- [34] J.C. COUTERNE et G. CIZERON, J.appl. cryst. 4 (1971) 461.

CHAPITRE III

ETUDE DE MODELISATION DE LA CROISSANCE SOUS IRRADIATION DE FEUILLARDS ZIRCALOY-4 DETENDUS EN FONCTION DE LEUR TEXTURE

3-1 INTRODUCTION

3-2 PRINCIPE DE CALCUL DES GRANDEURS PHYSIQUES MOYENNES

3-2-a Grandeurs physiques triaxiales.

3-2-b Grandeurs physiques uniaxiales.

3-3 LA CROISSANCE SOUS IRRADIATION

3-3-a La propriété considérée.

3-3-b Effet de la symétrie du cristal

3-3-c Effet de la symétrie de l'échantillon.

3-3-d Grandeur d'une propriété tensorielle symétrique de rang deux dans une direction arbitraire.

3-3-e Grandeur du monocristal.

3-3-f Croissance moyenne du polycristal.

3-4 ADAPTATION AUX CALCULS DE VARIATIONS DIMENSIONNELLES DE TUBES.

3-4-a Longueur d'une courbe paramétrée.

3-4-b Déformation d'une courbe paramétrée.

3-4-c Longueur d'une courbe déformée.

- 3-4-d Application aux changements dimensionnels.
- 3-4-e Variation de longueur axiale.
- 3-4-f Variation de longueur tangentielle (circonférence)
- 3-4-h Variation de longueur radiale (épaisseur)
- 3-5 COEFFICIENTS DE KEARNS
 - 3-5-a Calcul du coefficient de Kearns selon une direction arbitraire.
- 3-6 VARIATIONS VOLUMIQUES
 - 3-6-a Variation volumique du cristallite.
 - 3-6-b Variation volumique de l'échantillon.
 - 3-6-c Relations entre les déformations volumiques du cristal et de la tôle
- 3-7 SIGNIFICATION GEOMETRIQUE DES DEFORMATIONS PRINCIPALES.
 - 3-7-a Signification géométrique des déformations principales du cristallite.
 - 3-7-b Signification géométrique des déformations principales de la tôle.
- 3-8 COEFFICIENT DE CROISSANCE.
- 3-9 DETERMINATION DES DEFORMATIONS ϵ_c ET ϵ_a DU MONOCRISTAL
- 3-10 DETERMINATION DES DEFORMATIONS MONOCRISTALLINES DANS LE CAS DE CONSERVATION DE VOLUME.
- 3-11 CONCLUSION

3-1-INTRODUCTION :

La plupart des propriétés des cristaux sont anisotropes, c'est-à-dire qu'elles dépendent de la direction suivant laquelle elles sont mesurées [6]. Lorsque les matériaux polycristallins ont subi des traitements thermomécaniques ou un processus de mise en forme, on constate que les cristallites présentent des orientations préférentielles qui peuvent être nettement marquées. La répartition de ces orientations est définie comme texture cristallographique. De l'anisotropie des propriétés physiques monocristallines et de l'anisotropie de texture cristallographique résultent une anisotropie des propriétés macroscopiques moyennes [1,7,8].

L'anisotropie des propriétés macroscopiques est souvent d'autant plus marquée quand les réseaux cristallins ont une symétrie plus basse et la texture cristallographique est plus sévère. Ces circonstances se conjuguent toutes deux dans l'étude de la croissance sous irradiation de tôles de Zircaloy de symétrie cristalline hexagonale et dont la texture de laminage à froid est très marquée.

Comme première étape de toute étude, il est raisonnable de se concentrer sur l'anisotropie induite par la texture cristallographique, bien qu'en toute rigueur, les origines de l'anisotropie soient multiples et coopératives.

Cette anisotropie est liée à la morphologie (taille et forme de grain) et à la présence d'inhomogénéités (précipités). Ces caractéristiques dont on suppose que l'influence est mineure ne sont pas prises en compte directement et sont assimilées à des paramètres constants dans toute cette étude.

La théorie générale de calcul des valeurs moyennes des propriétés physiques anisotropes des matériaux polycristallins en fonction de la fonction de densité des orientations a été donnée par [1,2,3,4].

Dans la suite de ce travail nous appliquerons cette méthode pour établir un modèle de la croissance sous irradiation.

3-2- PRINCIPE DE CALCUL DES GRANDEURS PHYSIQUES MOYENNES

3-2-a. Grandeurs physiques triaxiales :

Les grandeurs physiques anisotropes les plus générales dépendent de l'orientation complète du repère lié au cristallite par rapport à un repère macroscopique (défini par l'expérimentateur) dans lequel sont mesurées la sollicitation et la réaction à cette sollicitation : elles sont appelées grandeurs triaxiales. Ceci est notamment le cas des constantes élastiques, de la surface limite d'écoulement plastique etc...

Soit $E(g)$ la propriété microscopique liée au cristallite d'orientation g . La valeur moyenne macroscopique de cette propriété au sein du polycristal est donnée par [2,3,4] :

$$\bar{E} = \langle f | E \rangle = \frac{1}{8\pi^2} \int_{\varphi_1=0}^{2\pi} \int_{\phi=0}^{\pi} \int_{\varphi_2=0}^{2\pi} E(g) f(g) dg \quad (3-1)$$

Dans ce modèle, la grandeur moyenne $\langle f | E \rangle$ apparaît comme la somme des grandeurs $E(g)$, pondérées par leur poids statistique $f(g)$ au sein du polycristal [12].

La fonction $E(g)$ peut être développée en série sur la base des fonctions harmoniques sphériques généralisées (simples ou symétrisées).

$$E(g) = \sum_{\lambda=0}^L \sum_{\mu=1}^{M(\lambda)} \sum_{\nu=1}^{N(\lambda)} e_{\lambda}^{\mu\nu} T_{\lambda}^{*\mu\nu}(g) \quad (3-2)$$

$T_{\lambda}^{*\mu\nu}$ sont les fonctions harmoniques sphériques généralisées.

L'astérisque * désigne la conjugaison complexe.

En remplaçant $f(g)$ et $E(g)$ par leur développement en série d'harmoniques sphériques généralisées doublement symétrisées dans l'intégrale (3-1), et en mettant à profit les propriétés d'orthogonalité des fonctions harmoniques sphériques généralisées (doublement symétrisées) l'expression (3-1) devient :

$$\bar{E} = \langle f | E \rangle = \sum_{\lambda=0}^L \sum_{\mu=1}^{M(\lambda)} \sum_{\nu=1}^{N(\lambda)} \frac{e_{\lambda}^{\mu\nu} c_{\lambda}^{\mu\nu}}{2\lambda + 1} \quad (3-3)$$

3-2-b Grandeurs physiques uniaxiales :

Les grandeurs physiques qui ne dépendent que de la seule direction de sollicitation définie par les angles de déclinaison θ et d'azimut γ par rapport au repère lié au cristallite sont appelées grandeurs physiques uniaxiales. Ceci est le cas de diverses grandeurs physiques, parmi lesquelles la croissance sous irradiation, la dilatation thermique, la conductivité, l'anisotropie magnétocristalline.

Ces propriétés ne dépendent pas de l'orientation g complète, mais uniquement de la direction cristalline \vec{h} [12] Dans ce cas ces propriétés peuvent être décrites par $E(\vec{h})$ (figure (3-1)).

La grandeur moyenne de cette propriété $\bar{E}(\vec{y})$ dans la direction \vec{y} d'un polycristal texturé correspond, dans les limites d'un modèle linéaire sans interaction entre grains, à la valeur moyenne prise sur le volume du polycristal, figure (3-2) :

$$\bar{E}(\vec{y}) = \sum_n \frac{\Delta V_n}{V} E(\vec{h}_n) \quad (3-4)$$

où $\frac{\Delta V_n}{V}$ représente la fraction volumique de cristallites ayant la direction \vec{h}_n parallèle à la direction macroscopique \vec{y} .

Par passage à la limite, la somme discrète de Riemann (3-4) tend vers l'intégrale continue :

$$\bar{E}(\vec{y}) = \langle A(\vec{h}, \vec{y}) | E(\vec{h}) \rangle = \frac{1}{4\pi} \int A(\vec{h}, \vec{y}) E(\vec{h}) d\vec{h} \quad (3-5)$$

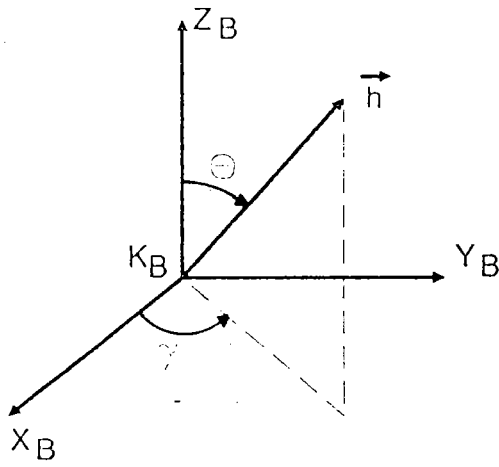


Figure 3-1 : Une propriété uniaxiale $E(h) = E(\theta, \gamma)$ ne dépend que d'une direction (repère lié au cristallite)

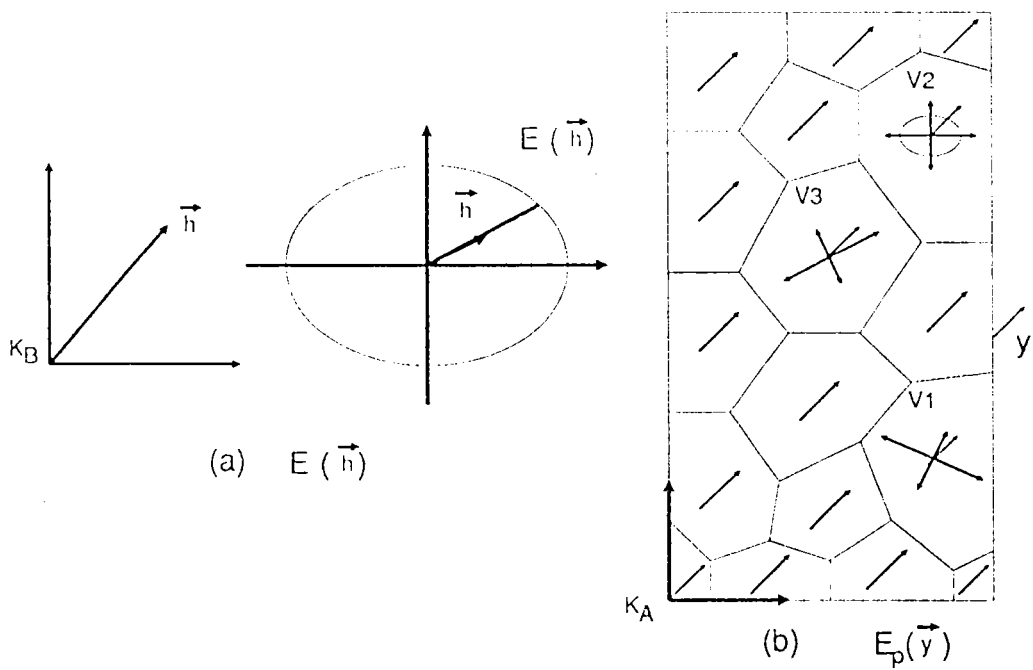


Figure 3-2 : Propriétés uniaxiales : a) du cristallite b) du polycrista

En fixant la direction d'échantillon particulière \vec{y} , la fonction de densité biaxiale $A(\vec{h}, \vec{y})$ livre comme cas particulier la figure de pôles inverse $R_{\vec{y}}(\vec{h})$, l'équation (3-5) devient :

$$\bar{E}(\vec{y}) = \frac{1}{4\pi} \int E(\vec{h}) R_{\vec{y}}(\vec{h}) d\vec{h} \quad (3-6)$$

L'intensité d'une grandeur physique uniaxiale $E(\vec{h})$ dans une direction \vec{h} du repère microscopique peut être développée en série sur la base des harmoniques sphériques de surface :

$$E(\vec{h}) = \sum_{l'=0}^L \sum_{m=-l'}^{+l'} e_{l'}^{m'} K_{l'}^{m'}(\vec{h}) \quad (3-7)$$

où les coefficients (de Fourier) $e_{l'}^{m'}$ traduisent l'anisotropie de la grandeur à l'échelle du monocristal dans le repère lié au cristallite.

- les fonctions harmoniques sphériques de surface $K_{l'}^{m'}(\vec{h})$ qui forment une base orthonormée sont définies de la manière suivante [3,13] :

$$K_{l'}^{m'}(\theta, \gamma) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im'\gamma} P_{l'}^{-m'}(\theta) \quad (3-8)$$

- $P_{l'}^{-m'}(\theta)$ [3,13] sont des fonctions de Legendre associées normalisées, et elles se décomposent en sommes finies de Fourier [14].

- L est la limite de la série qui dépend de la propriété considérée.

En reportant les développements en série de Fourier de la fonction de densité biaxiale $A(\vec{h}, \vec{y})$ éq (2-37) et de la grandeur physique $E(\vec{h})$ éq (3-7) dans l'expression de la moyenne $\bar{E}(\vec{y})$ éq (3-5), on obtient :

$$\bar{E}(y) = \frac{1}{4\pi} \oint \left[\sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{+l} \sum_{n=-l}^{+l} \frac{4\pi}{2l+1} C_l^{mn} K_l^{*m}(h) K_l^n(y) \right] \left[\sum_{l'=0}^L \sum_{m'=-l'}^{+l'} e_{l'}^{m'} K_{l'}^{m'}(h) \right] dh \quad (3-9)$$

$$\bar{E}(y) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{n=-l}^{+l} \sum_{n'=-l}^{+l} \sum_{l'=0}^L \sum_{m'=-l'}^{+l'} \frac{e_{l'}^{m'}}{2l+1} C_l^{mn} K_l^n(y) \oint K_l^{*m}(h) K_{l'}^{m'}(h) dh \quad (3-10)$$

L'intégration sur l'élément différentiel dh est immédiate grâce aux relations d'orthogonalité des fonctions harmoniques sphériques de surface :

$$\oint K_l^{*m}(h) K_{l'}^{m'}(h) dh = \oint K_l^{*m}(\theta, \gamma) K_{l'}^{m'}(\theta, \gamma) \sin \theta d\theta d\gamma = \delta_{ll'} \delta_{mm'} \quad (3-11)$$

L'équation intégrale (3-11) est égale à l'unité, si $l=l'$ et $m = m'$, sinon elle est nulle.

L'expression de la moyenne $\bar{E}(y)$ éq (3-10) est exprimée alors par :

$$\bar{E}(y) = \sum_{l=0}^L \sum_{n=-l}^{+l} \sum_{n'=-l}^{+l} \frac{1}{2l+1} C_l^{mn} e_l^m K_l^n(y) \quad (3-12)$$

Cette formule traduit que l'anisotropie de la grandeur physique moyenne macroscopique résulte de la conjugaison de l'anisotropie microscopique traduite par les coefficients e_l^m et de l'anisotropie de texture traduite par les

coefficients de texture C_l^{mn} .

Les équations (3-5) et (3-12) représentent les relations générales du calcul des grandeurs uniaxiales moyennes. Ces équations peuvent être adaptées aux symétries particulières des réseaux cristallins et de l'échantillon macroscopique.

3-3- LA CROISSANCE SOUS IRRADIATION :

Nous avons développé dans le cadre de ce travail un modèle de prédiction de la croissance sous irradiation où seuls sont pris en compte la texture des matériaux et la déformation anisotrope des monocristaux dont ils sont constitués. La déformation macroscopique du polycristal est évaluée par la moyenne des déformations des cristallites orientés, pondérée par leurs volumes respectifs.

Le choix des entiers l max, m et n est déterminé respectivement à partir de la propriété physique considérée, de la symétrie du cristal et de la symétrie de l'échantillon.

3-3-a. La propriété considérée :

Dans notre cas la propriété physique considérée est la croissance sous irradiation qui est représentée en première approximation par un tenseur de déformation qui est symétrique de rang deux. De ce fait la série (3-12) est tronquée.

$$l_{\max} = L \leq 2 \quad (3-13)$$

dans ce cas l ne prend que les deux valeurs $l = 0$ et $l = 2$ puisque les rangs l impairs ne sont différents de zéro qu'à partir de $l = 7$ dans le cas de la symétrie hexagonale.

3-3-b Effet de la symétrie du cristal.

Le Zircaloy a des grains de symétrie hexagonale qui ont des axes de symétrie d'ordre six. Cette symétrie impose que l'indice m soit un multiple de 6.

$$m = 6 m' \quad (3-14)$$

où m' est un entier, donc m prend les valeurs suivantes, 0, 12, 18 etc ...
 Par ailleurs m doit être compris entre - 1 et + 1. Ainsi dans le cas des propriétés de rang deux, m doit être compris entre - 2 et + 2 :

$$- 2 \leq m \leq + 2 \quad (3-15)$$

Dans le cas de la croissance sous irradiation, propriété de rang deux, m ne peut prendre que la valeur zéro :

$$m = 0 \quad (3-16)$$

Dans ce cas où $L = 2$ et $m = 0$ l'équation (3-7) devient :

$$E(h) = \sum_{l'=0}^2 e_{l'}^0 K_{l'}^0(h) \quad (3-17)$$

$$E(h) = e_0^0 K_0^0(h) + e_2^0 K_2^0(h) \quad (3-18)$$

D'après l'équation (3-8), $K_{l'}^0(h)$ est égale à :

$$K_{l'}^0(\theta, \gamma) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \bar{P}_{l'}(\theta) \quad (3-19)$$

On voit facilement que $E(h)$ dépend uniquement de l'angle θ , angle de déclinaison par rapport à $z_B // [0001]$, voir figure(3-3).

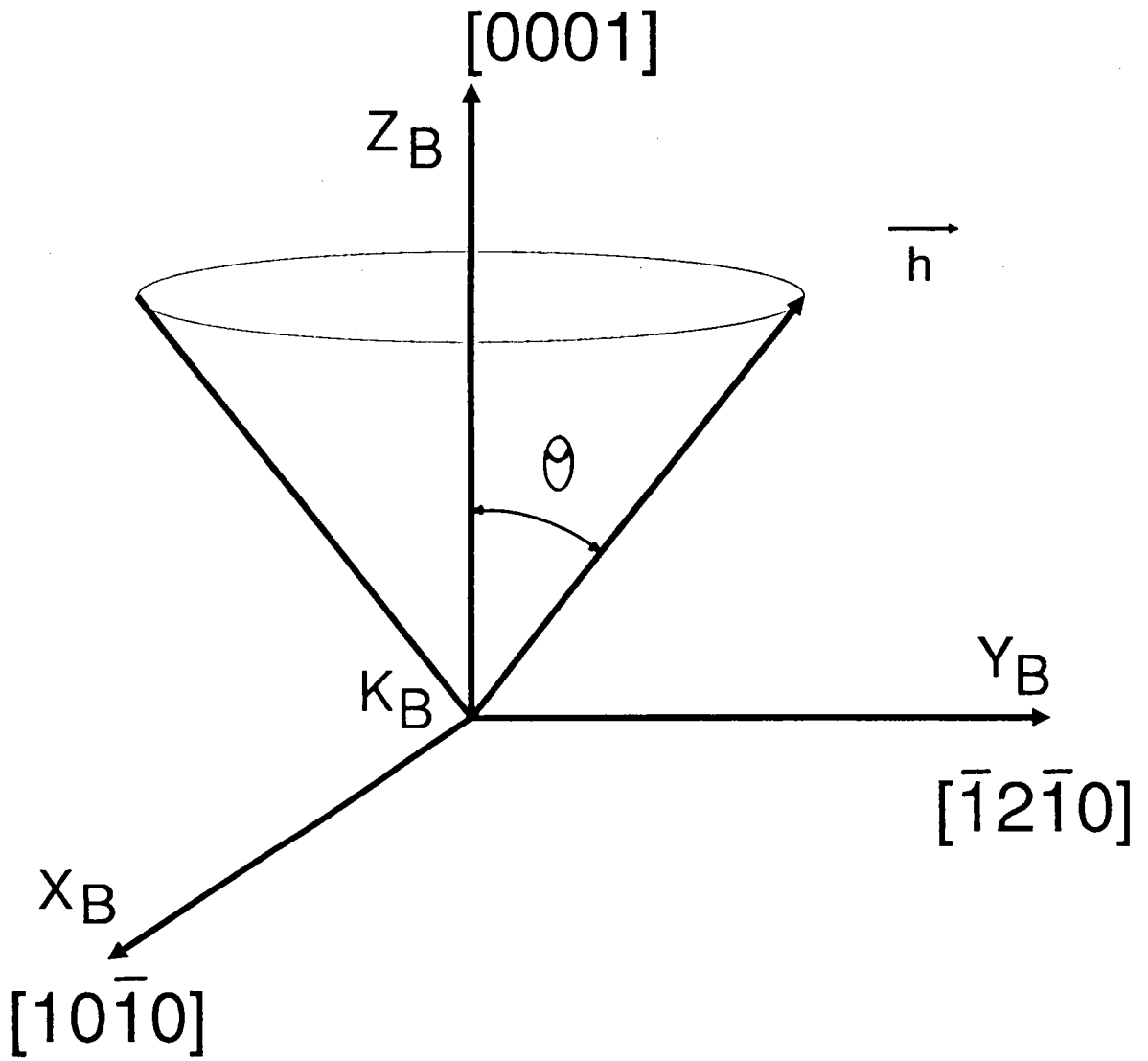


Fig. 3.3 : Dans le repère orthonormé (dans la maille du système hexagonal)
 La propriété $E(\vec{h})$ de rang deux, ne dépend que de l'angle θ .

Pour chaque θ fixe, en variant γ de 0 à 2π , h décrit un cône droit de demi-angle au sommet θ (figure 3-3) et E(h) est constant.

3-3-c. Effet de la symétrie de l'échantillon :

Les tôles de Zircaloy que nous avons étudiées ont une symétrie orthorhombique. Les axes de symétries sont portés par les trois directions principales de la tôle, i.e direction de laminage DL, direction transverse DT, direction normale DN.

La condition de symétrie nous impose :

$$n = 2n' \quad (3-20)$$

où n' est un entier.

3-3-d. Grandeur d'une propriété tensorielle symétrique de rang deux dans une direction arbitraire.

Une quadrique représentative peut être utilisée pour décrire n'importe quel tenseur symétrique de rang deux qui représente une propriété de rang 2 telle que la croissance sous irradiation, la dilatation thermique, la conductivité électrique, etc... Une quadrique quelconque prend sa forme la plus simple quand elle est rapportée à ses axes principaux il en est de même pour un tenseur de rang deux [5]. Ainsi :

$$[\epsilon_{ij}] = \begin{bmatrix} \epsilon_{11} & \epsilon_{12} & \epsilon_{13} \\ \epsilon_{21} & \epsilon_{22} & \epsilon_{23} \\ \epsilon_{31} & \epsilon_{32} & \epsilon_{33} \end{bmatrix} \quad (3-21)$$

Rapporté à ses axes principaux l'expression du tenseur devient :

$$[\epsilon_{ij}] = \begin{bmatrix} \epsilon_1 & 0 & 0 \\ 0 & \epsilon_2 & 0 \\ 0 & 0 & \epsilon_3 \end{bmatrix} \quad (3-22)$$

$\epsilon_1, \epsilon_2, \epsilon_3$ sont les composantes principales du tenseur.

L'intensité d'une propriété tensorielle symétrique de rang deux dans une direction arbitraire de cosinus directeur, $(\cos \theta_1, \cos \theta_2, \cos \theta_3)$ (dans le repère principal du cristal figure (3-4)) est donnée par la relation suivante [5] :

$$\varepsilon = (\cos \theta_1, \cos \theta_2, \cos \theta_3) \begin{pmatrix} \varepsilon_1 & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_2 & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \theta_1 \\ \cos \theta_2 \\ \cos \theta_3 \end{pmatrix} \quad (3-23)$$

ou, sous forme développée :

$$\varepsilon = \varepsilon_1 \cos^2 \theta_1 + \varepsilon_2 \cos^2 \theta_2 + \varepsilon_3 \cos^2 \theta_3 \quad (3-24)$$

Dans le cas d'un monocristal hexagonal ε_1 est égal à ε_2 puisqu'on a une symétrie de révolution autour de l'axe [5,15,16].

L'équation (3-24) devient alors :

$$\varepsilon = \varepsilon_1 (\cos^2 \theta_1 + \cos^2 \theta_2) + \varepsilon_3 \cos^2 \theta_3 \quad (3-25)$$

Sachant que :

$$\cos^2 \theta_1 + \cos^2 \theta_2 = 1 - \cos^2 \theta_3 \quad (3-26)$$

L'équation (3-25) devient finalement :

$$\varepsilon = \varepsilon_3 \cos^2 \theta_3 + \varepsilon_1 (1 - \cos^2 \theta_3) \quad (3-27)$$

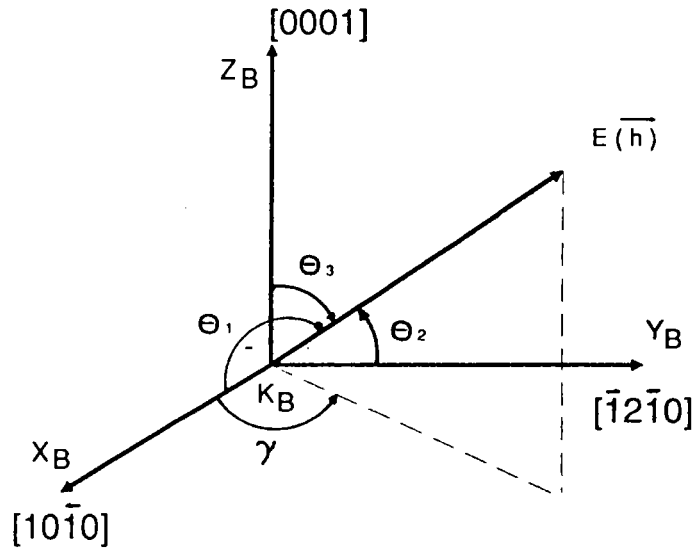


Fig. 3-4 : Grandeur d'une propriété $E(\vec{h})$ de rang deux, selon une direction h de cosinus directeur $(\cos \theta_1, \cos \theta_2, \cos \theta_3)$ dans le repère lié au cristallite.

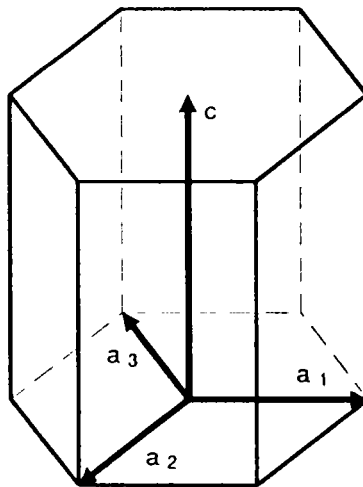


Fig. 3-5 : Représentation schématique de la symétrie radiale autour de l'axe C dans le plan basal.

3-3-e. Croissance du monocristal.

Les modifications dimensionnelles du cristal de Zircaloy peuvent être représentées dans le cadre d'hypothèse de petite déformation par un tenseur symétrique de rang deux, identique à l'équation (3-22) où :

$\epsilon_1 = \epsilon_2 = \epsilon_a$ car la déformation dans le plan basal est de symétrie radiale autour de l'axe C (figure (3-5)) et $\epsilon_3 = \epsilon_c$ déformation dans la direction C.

$$[\epsilon] = \begin{bmatrix} \epsilon_a & 0 & 0 \\ 0 & \epsilon_a & 0 \\ 0 & 0 & \epsilon_c \end{bmatrix} \quad (3-28)$$

La déformation dans une direction quelconque \vec{h} du monocristal repérée par les angles (θ, γ) s'exprime par la relation (3-27), où $\theta_3 = \theta$ (figure 3-4) :

$$E(h) = E(\theta, \gamma) = \epsilon_c \cos^2 \theta + \epsilon_a (1 - \cos^2 \theta) \quad (3-29)$$

En égalisant l'équation (3-18) de $E(h)$ à l'équation (3-29) de $E(h)$, on aura :

$$e_0^0 K_0^0(h) + e_2^0 K_2^0(h) = \epsilon_c \cos^2 \theta + \epsilon_a (1 - \cos^2 \theta) \quad (3-30)$$

$K_0^0(h)$ et $K_2^0(h)$ sont calculés dans l'annexe II ; l'éq. (3-30) devient :

$$\frac{e_0^0}{\sqrt{4\pi}} + e_2^0 \sqrt{\frac{5}{4\pi}} \times \frac{1}{2} (3 \cos^2 \theta - 1) = \epsilon_c \cos^2 \theta + \epsilon_a (1 - \cos^2 \theta) \quad (3-31)$$

ou encore :

$$e_2^0 \frac{3}{2} \sqrt{\frac{5}{4\pi}} \cos^2 \theta + \frac{e_0^0}{\sqrt{4\pi}} - \frac{e_2^0}{2} \sqrt{\frac{5}{4\pi}} = (\epsilon_c - \epsilon_a) \cos^2 \theta + \epsilon_a \quad (3-32)$$

Par comparaison des coefficients de $\cos^2 \theta$, on aura :

$$e_2^0 \frac{3}{2} \sqrt{\frac{5}{4\pi}} = \epsilon_c - \epsilon_a \quad (3-33)$$

Par comparaison des constantes, on aura :

$$\frac{e_0^0}{\sqrt{4\pi}} - \frac{e_2^0}{2} \sqrt{\frac{5}{4\pi}} = \epsilon_a \quad (3-34)$$

Finalement on a :

$$e_0^0 = \sqrt{\frac{4\pi}{3}} (\epsilon_c + 2\epsilon_a) \quad (3-35)$$

$$e_2^0 = \sqrt{2\pi} \sqrt{\frac{2}{5}} \times \frac{2}{3} (\epsilon_c - \epsilon_a) \quad (3-36)$$

3-3-f. Croissance moyenne du polycristal.

Pour déterminer la déformation moyenne d'une tôle polycristalline de Zircaloy dans une direction $y = (\alpha, \beta)$ (figure (3-6)) il suffit d'imposer les conditions des équations (3-14), (3-16) et (3-20) à l'expression générale de la moyenne, équation (3-12). On obtient alors :

$$\bar{E}(y) = \sum_{l=0}^2 \sum_{n=-l}^{+l} \frac{1}{2^{l+1}} C_l^{0n} e_l^0 K_l^n(y) \quad (3-37)$$

qui devient après développement :

$$\bar{E}(y) = e_0^0 C_0^{00} K_0^0(y) + \frac{e_2^0}{5} (C_2^{0-2} K_2^{-2}(y) + C_2^{0-1} K_2^{-1}(y) + C_2^{00} K_2^0(y) + C_2^{01} K_2^1(y) + C_2^{02} K_2^2(y)) \quad (3-38)$$

En exploitant les relations de conjugaison

$$C_l^{m-n} = (-1)^{l+m+n} C_l^{-mn*} \quad (3-39)$$

$$K_l^{-n}(y) = (-1)^{l+n} K_l^n(y)^* \quad (3-40)$$

On obtient en particulier :

$$C_2^{0-n} = (-1)^n C_2^{0n*} \quad (3-41)$$

$$K_2^{-n}(y) = (-1)^n K_2^n(y)^* \quad (3-42)$$

L'équation (3-38) devient alors :

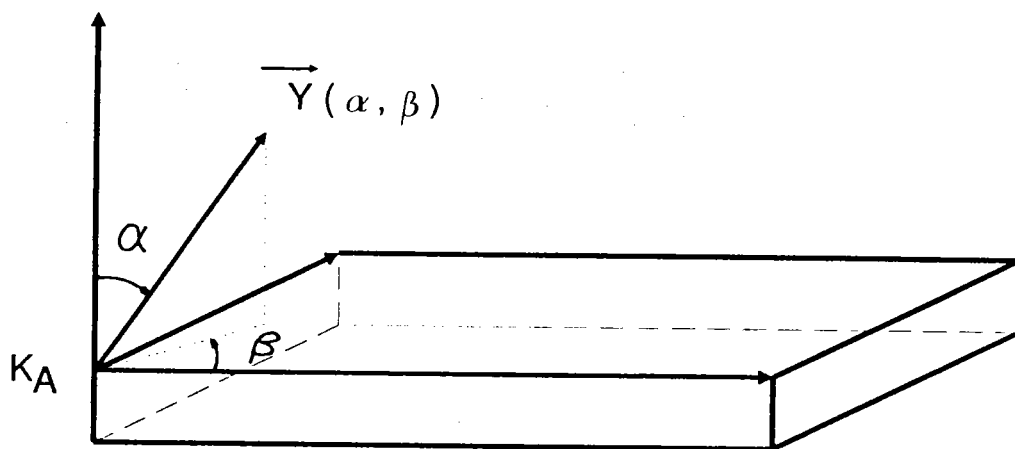


Fig. (3-6) : Repérage d'une direction $y = (\alpha, \beta)$ dans le repère principal (DL, DT, DN) de la tôle d'un polycristal.

$$\bar{E}(y) = e_0^{000} C_0^0 K_0(y) + \frac{e_2^0}{5} (C_2^{02*} K_2^2(y) + C_2^{02} K_2^2(y) + C_2^{01*} K_2^1(y) + C_2^{01} K_2^1(y) + C_2^{00} K_2^0(y))$$

(3-43)

En utilisant les expressions (3-35) et (3-36) ainsi que l'expression (3-8) des fonctions harmoniques de surface on peut exprimer la valeur moyenne \bar{E} dans la direction \vec{y} de l'échantillon définie par les angles de déclinaison α et d'azimut β par :

$$\bar{E}(\vec{y}) = \bar{E}(\alpha, \beta) = W(\alpha, \beta) \varepsilon_c + (1 - W(\alpha, \beta)) \varepsilon_a \quad (3-44)$$

$W(\alpha, \beta)$ représente une fonction de pondération dépendant de la texture :

$$\begin{aligned} W(\alpha, \beta) = & \frac{1}{3} + \frac{1}{15} C_2^{00} (3 \cos^2 \alpha - 1) \\ & + \frac{2}{5} \sqrt{\frac{2}{3}} \sin \alpha \cos \alpha \left[\text{Re } C_2^{01} \cos \beta - \text{Im } C_2^{01} \sin \beta \right] \\ & + \frac{1}{5} \sqrt{\frac{2}{3}} (1 - \cos^2 \alpha) \left[\text{Re } C_2^{02} \cos 2\beta - \text{Im } C_2^{02} \sin 2\beta \right] \end{aligned} \quad (3-45)$$

$\text{Re } C_1^{mn}$, $\text{Im } C_1^{mn}$ représentent respectivement la partie réelle et la partie imaginaire des coefficients C_1^{mn} qui sont complexes.

Le détail de ces calculs est fourni en annexe III.

$-K_0^0(y)$, $K_2^0(y)$, $K_2^1(y)$, $K_2^2(y)$, sont donnés dans l'annexe II.

$C_0^{00} = 1$ correspond à la condition de normalisation de la F.D.O.

En tenant compte de la symétrie orthorhombique des échantillons, les coefficients $\text{Re}C_2^{01}$ et $\text{Im}C_2^{01}$ disparaissent et le coefficient $\text{Im}C_2^{02}$ est nul.

De fait l'expression de $W(\alpha, \beta)$ se simplifie :

$$W(\alpha, \beta) = \frac{1}{3} + \frac{1}{15}(3 \cos^2 \alpha - 1) C_2^{00} + \frac{1}{5} \sqrt{\frac{2}{3}} \cos 2\beta (1 - \cos^2 \alpha) \text{Re} C_2^{02} \quad (3-46)$$

L'application directe de la relation (3-44) permet le calcul de la déformation moyenne d'un échantillon polycristallin de symétrie orthorhombique dans une direction donnée pourvu que soient connues les composantes du tenseur de déformation du monocristal.

3-4 ADAPTATION AUX CALCULS DE VARIATIONS DIMENSIONNELLES DE TUBES.

Le problème des variations dimensionnelles des tubes est étudié du point de vue le plus général. Une courbe gauche (non plane) quelconque inscrite sur la surface du tube est décrite par les techniques d'études des courbes paramétrées propres à la géométrie différentielle. Sous l'effet de l'irradiation, le tube se déforme et les points de la courbe subissent un champ de déplacement. Compte tenu de ce champ de déplacement, toute courbe paramétrée subit une variation de longueur, qui est étudiée comme un développement en série en fonction des puissances du champ de déformation (i.e. gradient du champ de déplacement). Par analogie avec la théorie de l'élasticité linéaire, on limite les développements en série aux termes du premier ordre en déformation.

3-4-a. Longueur d'une courbe paramétrée.

Le vecteur de situation décrivant une courbe paramétrée est représenté par :

$$t \longmapsto \vec{OM}(t) = \vec{\gamma}(t) \quad (3-47)$$

Vecteur tangent ou vecteur "vitesse" (figure 3-7) :

$$\vec{\gamma}(t) = \frac{d\vec{\gamma}}{dt} = \frac{d\vec{OM}(t)}{dt} \quad (3-48)$$

La longueur de la courbe est donnée par, (figure 3-7) :

$$\text{longueur}(\gamma) = \int_{t_0}^{t_1} \|\dot{\gamma}(t)\| dt \quad (3-49)$$

3-4-b. Déformation d'une courbe paramétrée.

Si $\gamma(t)$: vecteur de situation initiale.

Le vecteur de situation courbe déformée est donné par (figure 3-8) :

$$\vec{\gamma}_d(t) = \vec{\gamma}(t) + \vec{u}(\gamma(t)) \quad (3-50)$$

Son vecteur tangent :

$$\dot{\gamma}_d(t) = \frac{d\gamma_d(t)}{dt} = \frac{d\gamma}{dt} + \frac{Du}{Dx} \frac{d\gamma}{dt} \quad (3-51)$$

avec les notations :

$$\frac{Du}{Dx} = \left(\frac{\delta u_i}{\delta x_j} \right) \quad (3-52)$$

En élevant l'eq. (3-51) au carré on aura :

$$\left(\frac{d\gamma_d}{dt} \right)^2 = \left(\frac{d\gamma}{dt} \right)^2 + 2 \frac{Du}{Dx} \frac{d\gamma}{dt} \frac{d\gamma}{dt} + \left(\frac{Du}{Dx} \frac{d\gamma}{dt} \right)^2 \quad (3-53)$$

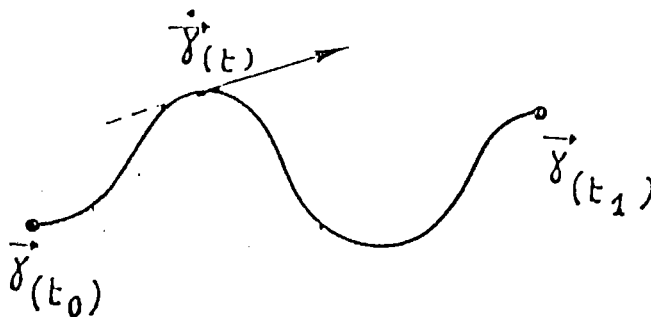


Fig. (3-7) : Longueur du segment de courbe paramétrée compris entre les valeurs t_0 et t_1 du paramètre.

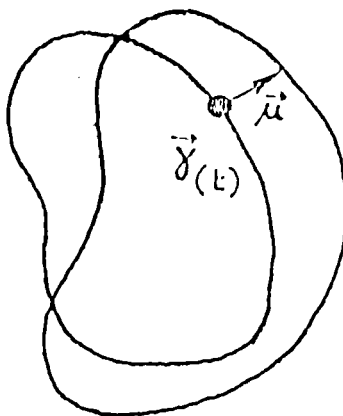


Fig. (3-8) : Déformation d'une courbe paramétrée ayant subi un champ de déplacement $\mu(\gamma(t))$.

Avec les notations :

$$\frac{Du}{Dx} = \frac{\delta u_i}{\delta x_j} = (\varepsilon_{ij}) \quad (3-54)$$

$$\frac{d\gamma}{dt} = V \text{ i.e. } \frac{d\gamma_i}{dt} = V_i \quad (\text{vecteur tangent à la courbe paramétrée}) \quad (3-55)$$

$$\frac{Du}{Dx} \frac{d\gamma}{dt} \frac{d\gamma}{dt} = \varepsilon_{ij} V_i V_j \quad (3-56)$$

Cette expression est une forme bilinéaire symétrique en V_i, V_j [18] : elle ne dépend que de la partie symétrique du tenseur gradient de déplacement i.e. de la partie déformation pure :

$$\left\| \frac{d\gamma_d}{dt} \right\| = \left[\left(\frac{d\gamma}{dt} \right)^2 + 2 \varepsilon_{ij} V_i V_j + \left(\varepsilon_{ij} \frac{d\gamma}{dt} \right)^2 \right]^{1/2} \quad (3-57)$$

en négligeant le terme de ε_{ij}^2 par rapport au terme de ε_{ij} , l'éq. (3-57)

devient :

$$\left\| \frac{d\gamma_d}{dt} \right\| \approx \left[\left(\frac{d\gamma}{dt} \right)^2 + 2 \varepsilon_{ij} V_i V_j \right]^{1/2} = \left\| \frac{d\gamma}{dt} \right\| \sqrt{1 + 2 \frac{\varepsilon_{ij} V_i V_j}{\left\| \frac{d\gamma}{dt} \right\|^2}} \quad (3-58)$$

Après un développement limité au premier ordre l'éq. (3-58) devient :

$$\left\| \frac{d\gamma_d}{dt} \right\| \approx \left\| \frac{d\gamma}{dt} \right\| + \frac{\varepsilon_{ij} V_i V_j}{\left\| \frac{d\gamma}{dt} \right\|} \quad (3-59)$$

3-4-c. Longueur de la courbe déformée :

En intégrant l'équation (3-58) sur le paramètre t conformément à l'équation (3-49), on obtient :

$$\text{Longueur}(\gamma_d) = \text{Longueur}(\gamma) + \int_{t_0}^{t_1} \frac{\epsilon_{ij} V_i V_j}{\left\| \frac{d\gamma}{dt} \right\|} dt \quad (3-60)$$

Dans la pratique, il est courant de choisir comme paramètre de la courbe la longueur s de la courbe (paramètre dit "naturel" en géométrie différentielle) [19].

Avec ce choix particulier de paramètre, $t = s$ et les diverses formules se simplifient encore :

$$\frac{d\gamma_i}{ds} = T_i \text{ (vecteur unitaire tangent)} \quad (3-61)$$

Sa norme est l'unité i.e. :

$$\left\| \frac{d\gamma}{ds} \right\| = 1 \quad (3-62)$$

L'équation (3-60) devient alors :

$$\text{Longueur}(\gamma_d) = \text{Longueur}(\gamma) + \int_{s_0}^{s_1} \epsilon_{ij} T_i T_j ds \quad (3-63)$$

3-4-d. Application aux changements dimensionnels. [11].

La formule précédente de changement de longueur d'une courbe déformée est tout à fait générale. Comme les courbes générales sont gauches (non planes), il faut prendre soin d'exprimer les relations différentielles dans le repère local associé au système de coordonnées (cylindriques, dans le problème envisagé) (figure (3-8)). On ne retrouve

l'analogie avec le problème de croissance de tôle que dans les limites d'approximation linéaire dans le plan tangent.

Le calcul d'un changement dimensionnel quelconque requiert en effet le calcul d'intégrales curvilignes en coordonnées cylindriques.

Dans la pratique, les changements dimensionnels qui intéressent l'ingénieur sont les changements de longueur, de circonférence (c'est à dire de rayon) et d'épaisseur. Dans les trois cas, les courbes à considérer sont les courbes de coordonnées associées au système de coordonnées cylindriques. Les calculs sont alors particulièrement simples, et permettent d'établir rigoureusement un résultat dont le "bon sens" nous donne l'intuition : pour les changements de dimensions principales du cylindre, le modèle de croissance des tôles, valable dans le plan tangent, peut être étendu à l'ensemble du cylindre considéré comme étant simplement "déroulé" (figure 3-10)

3-4-e. Variation de longueur axiale.

$$\text{paramètre } s = x_1 \quad (3-64)$$

$$\frac{dy}{ds} = e_1 \quad (3-65)$$

$$e_1 \cdot e_1 = e_2 \cdot e_2 = e_3 \cdot e_3 = 1 \quad (3-66)$$

si on a : $i = j = 1$, on aura :

$$\varepsilon \frac{dy}{ds} \cdot \frac{dy}{ds} = \varepsilon_{ij} e_i e_j = \varepsilon_{11} e_1 e_1 = \varepsilon_{11} \quad (3-67)$$

L'équation (3-63) devient dans ce cas :

$$\text{Longueur } (L_d) = \text{longueur } (L) + \int_{s_0}^{s_1} \varepsilon_{11} ds \quad (3-68)$$

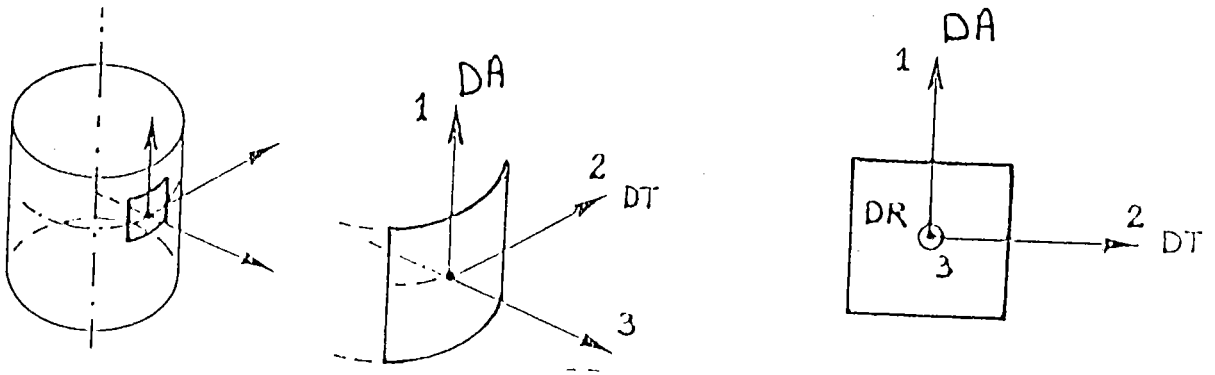


Fig. 3-9 : Définition du repère local associé aux coordonnées cylindriques.

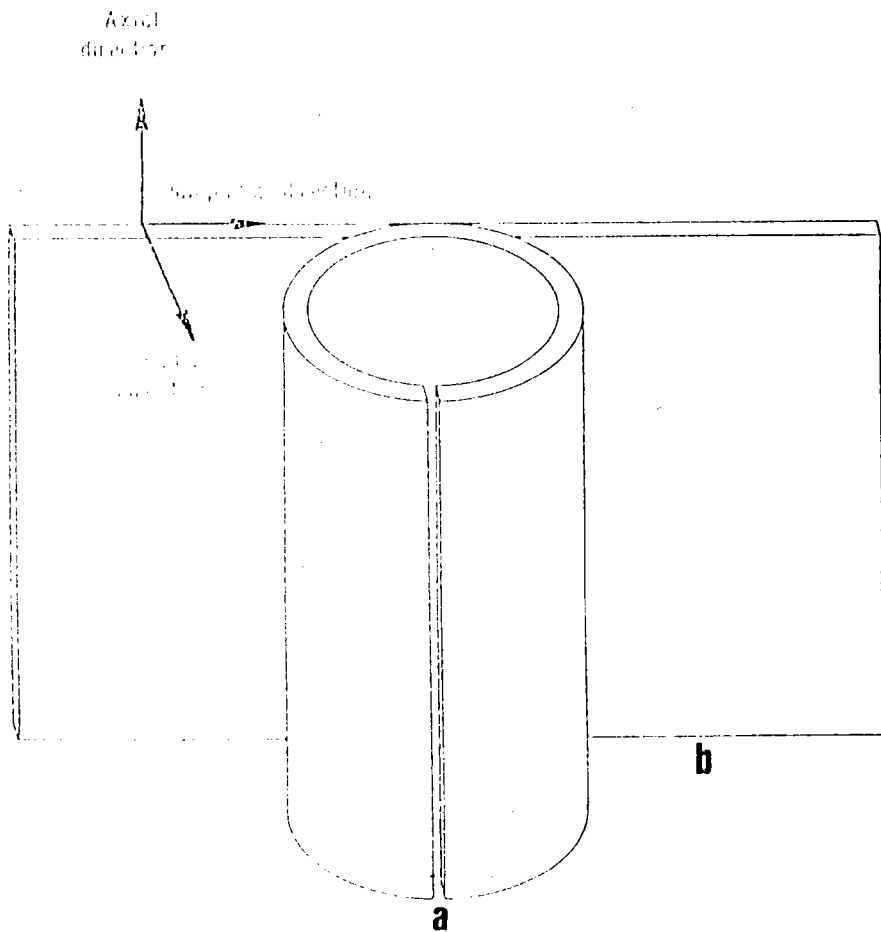


Fig. 3-10 : -(a) montre que le modèle de croissance des tôles reste valable pour le changement de dimensions principales du cylindre
 -(b) tube "déroulé" pour la mesure de texture par les méthodes relatives aux mesures de texture sur les tôles [17].

$$\text{Longueur}(L_d) = \text{longueur}(L) + \text{Longueur}(L) \times \epsilon_{11} \quad (3-69)$$

ce qui donne ϵ_{11} :

$$\epsilon_{11} = \frac{\text{Longueur}(L_d) - \text{Longueur}(L)}{\text{Longueur}(L)} = \frac{\Delta L}{L} \quad (3-70)$$

3-4-f. Variation de longueur tangentielle (circonférence).

$$\text{paramètre } x_2 = s = R.\varphi \quad (3-71)$$

R désigne le rayon et φ l'angle polaire.

$$\frac{d\gamma}{ds} = \epsilon_2 \quad (3-72)$$

$$\epsilon \frac{d\gamma}{ds} \frac{d\gamma}{ds} = \epsilon_{ij} e_i e_j = \epsilon_{22} \quad (3-73)$$

$$\text{Longueur}(L_d) = \text{longueur}(L) + \int_{s_0}^{s_1} \epsilon_{22} ds \quad (3-74)$$

$$\text{Longueur}(L_d) = \text{Longueur}(L) + \text{Longueur}(L) \epsilon_{22}$$

$$\epsilon_{22} = \frac{2\pi R_d - 2\pi R}{2\pi R} = \frac{2\pi \Delta R}{2\pi R} = \frac{\Delta R}{R} \quad (3-75)$$

3-4-h. Variation de longueur radiale (épaisseur).

$$\text{paramètre } x_3 = s \quad (3-76)$$

$$\frac{d\gamma}{ds} = \epsilon_3 \quad (3-77)$$

$$\epsilon \frac{d\gamma d\gamma}{ds ds} = \epsilon_{ij} e_i e_j = \epsilon_{33} \quad (3-78)$$

$$\text{Longueur}(e_d) = \text{longueur}(e) + \int_{s_0}^{s_1} \epsilon_{33} ds \quad (3-79)$$

$$\epsilon_{33} = \frac{\text{Longueur}(e_d) - \text{longueur}(e)}{\text{longueur}(e)} = \frac{\Delta e}{e} \quad (3-80)$$

Pour une telle étude, les cylindres doivent être amincis pour pouvoir être "déroulés" sans quitter le domaine de déformation élastique. Pour de tels échantillons "déroulés" plans, le repère local (DA, DT, DR) garde une orientation constante et devient le repère d'échantillon d'une tôle pour la mesure de figures de pôles et le calcul de la fonction de densité des orientations [17] (figure 3-10). Cette texture est également significative pour calculer les changements de dimensions dans les directions principales du cylindre. Les directions sont confondues avec les axes du repère (cartésien) lié au cylindre déroulé, auquel le modèle de croissance établi pour la tôle peut être appliqué. La direction radiale DR du cylindre coïncide avec la direction normale DN de l'échantillon plan déroulé, la direction tangentielle DT avec la direction de laminage DL, et la direction axiale DA avec la direction transverse DT.

3-5 COEFFICIENTS DE KEARNS

L'expression (3-29) montre que la déformation dans une direction cristalline $\vec{h}(\theta, \gamma)$ d'un cristal hexagonal ne dépend que de l'angle θ entre cette direction et l'axe c du monocristal. Ainsi dans une direction $\vec{y}(\alpha, \beta)$ de l'échantillon, telle que la direction normale DN de l'échantillon par exemple, la déformation est la valeur moyenne de la contribution des cristallites dont l'axe \vec{c} fait un angle α avec la direction normale (fig.3-11). On constate dans ce cas que le lieu géométrique de ces axes \vec{c} considérés est un cône droit, d'axe DN, et d'angle au centre α (fig.(3-12)).

Dans ces conditions la fonction de pondération n'est autre que la fonction de densité de tous les axes c qui font un angle α avec la normale [10] soit :

$$H(\alpha) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} P_{(0001)}(\alpha, \beta) d\beta \quad (3-81)$$

$P_{(0001)}(\alpha, \beta)$ étant la densité de pôles des axes c .

Pour un angle α fixe donné, la déformation élémentaire selon la direction \overrightarrow{DN} (telle que \vec{h} soit parallèle à \overrightarrow{DN}) est donnée par :

$$E(h) H(\alpha) = E(\alpha) \cdot H(\alpha) = \left[\epsilon_c \cos^2 \alpha + \epsilon_a (1 - \cos^2 \alpha) \right] H(\alpha) \quad (3-82)$$

En intégrant sur tous les angles α possibles et compte tenu de l'élément différentiel d'intégration $(\sin \alpha d\alpha)$ (figure 3-11a) la déformation dans la direction DN s'exprime par :

$$E_{DN} = \frac{1}{2} \int_0^\pi \left[\epsilon_a (1 - \cos^2 \alpha) + \epsilon_c \cos^2 \alpha \right] H(\alpha) \sin \alpha d\alpha \quad (3-83)$$

En posant

$$F_N = \frac{1}{4\pi} \int_{\beta=0}^{2\pi} \int_{\alpha=0}^{\pi} P_{(0001)}(\alpha, \beta) \cos^2 \alpha \sin \alpha d\alpha d\beta \quad (3-84)$$

on obtient :

$$E_{DN} = \epsilon_a (1 - F_N) + \epsilon_c F_N \quad (3-85)$$

On peut réitérer ce calcul pour d'autres directions macroscopiques particulières telles que DL et DT pour lesquelles les relations angulaires respectives peuvent être aisément déduites de la figure (3-14).

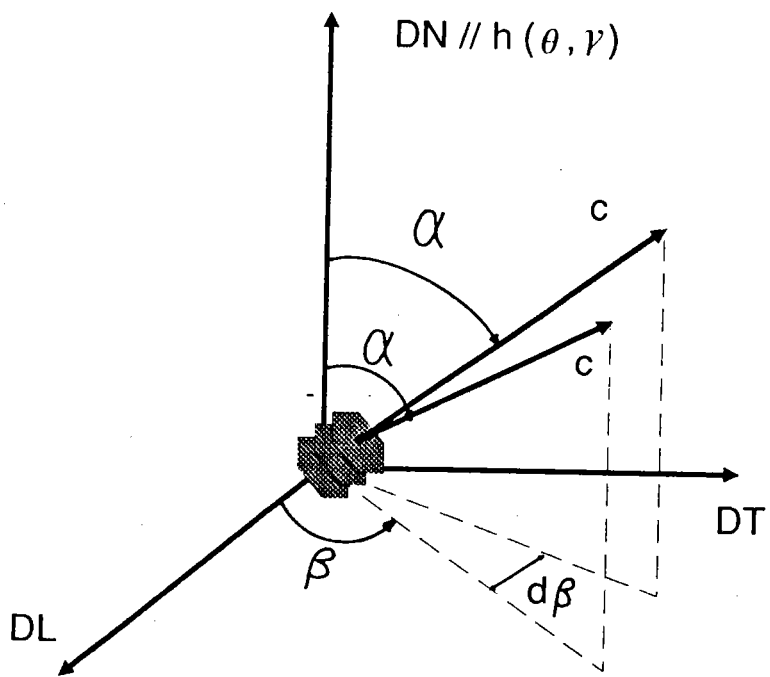


Fig. (3-11) : Représentation des cristallites dont l'axe C fait un angle α fixe avec la direction normale.

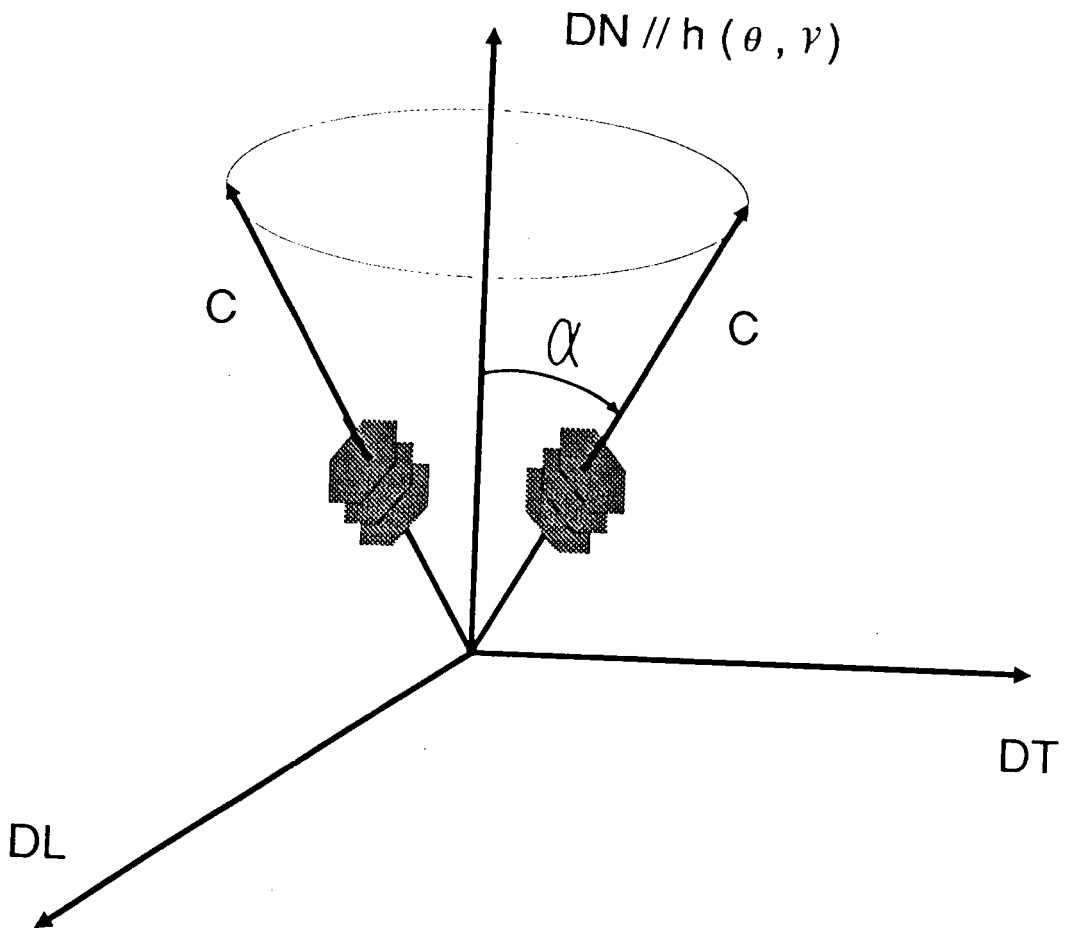


Fig. (3-12) : En variant β de 0 à 2π , les axes C, faisant un angle α fixe avec la direction normale de la tôle, décrivent un cône droit dont son axe de symétrie est DN et son angle au centre α .

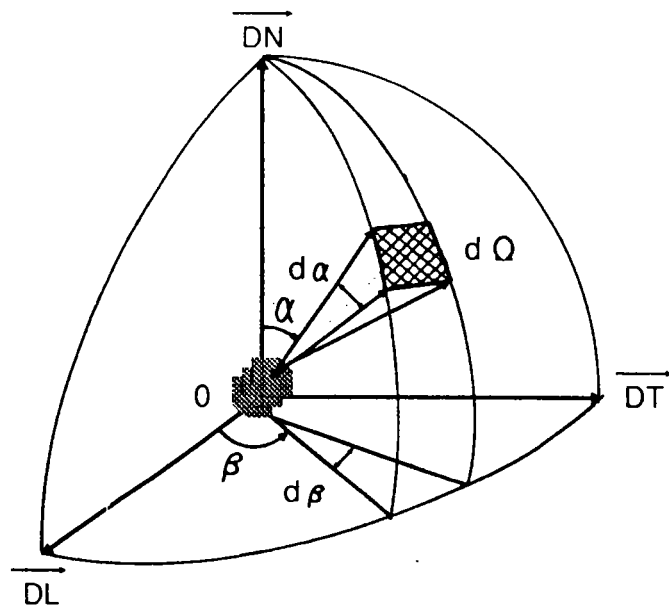
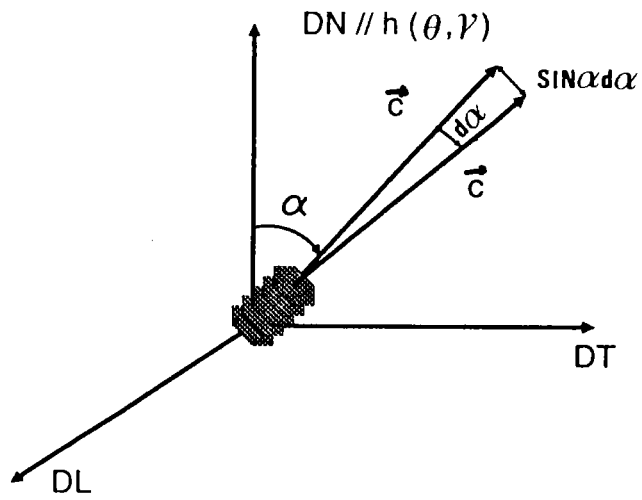


Fig. (3-13) : a) Représentation de l'élément différentiel d'intégration $\sin \alpha d\alpha$
 b) Représentation schématique de l'élément d'angle solide $d\Omega = \sin \alpha d\alpha d\beta$.

Il vient alors :

$$E_{DL} = \frac{1}{2} \int_{\alpha_L=0}^{\pi} \left[\epsilon a (1 - \cos^2 \alpha_L) + \epsilon c \cos^2 \alpha_L \right] H(\alpha) \sin \alpha d\alpha \quad (3-86)$$

avec $(\cos \alpha_L = \sin \alpha \cos \beta)$

$$E_{DT} = \frac{1}{2} \int_{\alpha_T=0}^{\pi} \left[\epsilon a (1 - \cos^2 \alpha_T) + \epsilon c \cos^2 \alpha_T \right] H(\alpha) \sin \alpha d\alpha \quad (3-87)$$

avec $(\cos \alpha_T = \sin \alpha \sin \beta)$

En posant :

$$F_L = \frac{1}{4\pi} \int_{\beta=0}^{2\pi} \int_{\alpha=0}^{\pi} P_{(0001)}(\alpha, \beta) \cos^2 \alpha_L \sin \alpha d\alpha d\beta \quad (3-88)$$

et :

$$F_T = \frac{1}{4\pi} \int_{\beta=0}^{2\pi} \int_{\alpha=0}^{\pi} P_{(0001)}(\alpha, \beta) \cos^2 \alpha_T \sin \alpha d\alpha d\beta \quad (3-89)$$

on peut alors écrire :

$$E_{DL} = \epsilon c F_L + \epsilon a (1 - F_L) \quad (3-90)$$

$$E_{DT} = \epsilon c F_T + \epsilon a (1 - F_T) \quad (3-91)$$

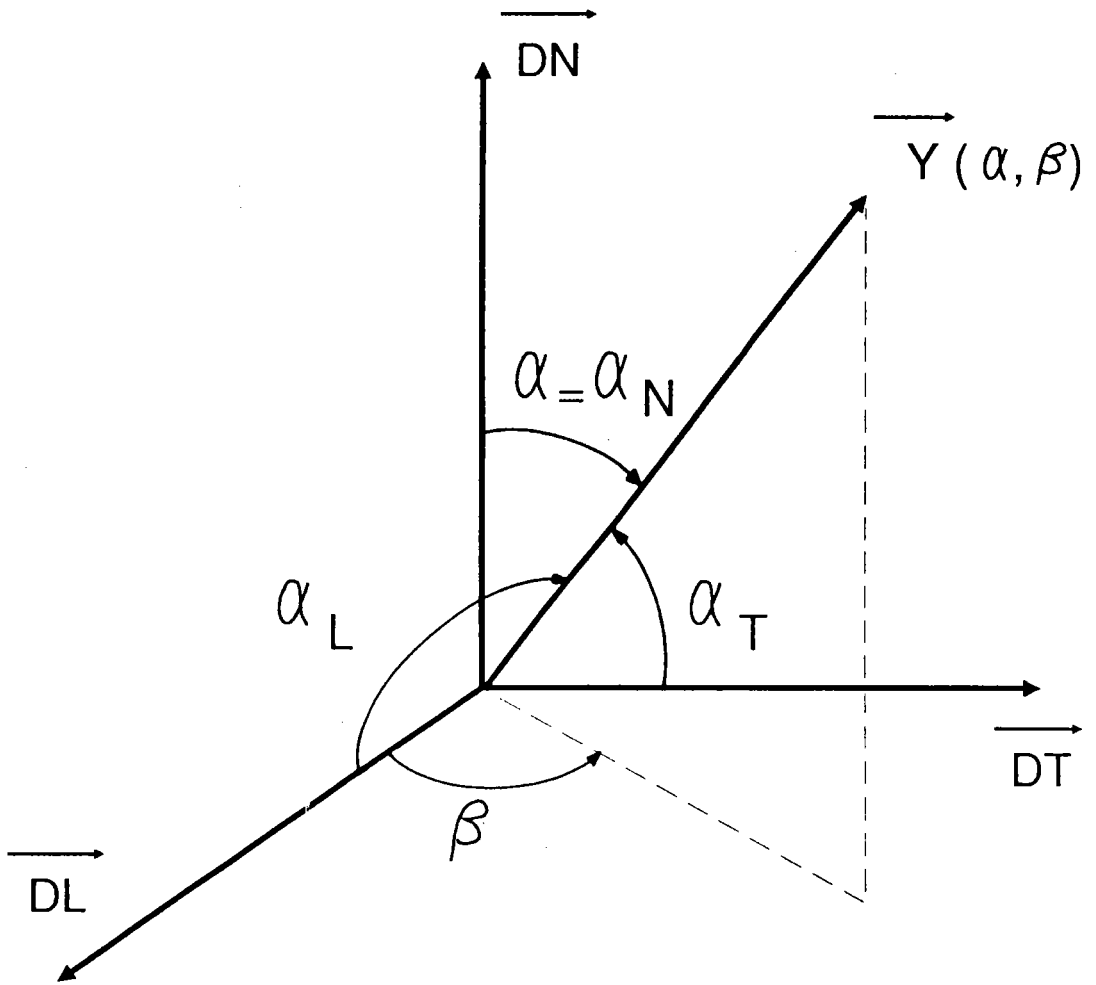


Fig. (3-14) : Relations angulaires entre α , α_L et α_T .

Les expressions (3-85), (3-90), (3-91) ne sont que des valeurs particulières de la formule traditionnelle de la valeur moyenne de la croissance sous irradiation et les quantités F_L , F_T , F_N ne sont autres que les coefficients bien connus de KEARNS [20-21].

En remarquant que :

$$E_{DL} = \bar{E}(90,0) \quad (3-92)$$

$$\bar{E}_{DT} = \bar{E}(90,90) \quad (3-93)$$

$$\bar{E}_{DN} = \bar{E}(0,0) \quad (3-94)$$

On peut alors identifier les coefficients de KEARNS principaux aux valeurs particulières de la fonction $W(\alpha, \beta)$ éq.(3-46) ainsi :

$$F_L = W(90,0) = \frac{1}{3} - \frac{1}{15} C_2^{00} + \frac{1}{5} \sqrt{\frac{2}{3}} \operatorname{Re} C_2^{02} \quad (3-95)$$

$$F_T = W(90,90) = \frac{1}{3} - \frac{1}{15} C_2^{00} - \frac{1}{5} \sqrt{\frac{2}{3}} \operatorname{Re} C_2^{02} \quad (3-96)$$

$$F_N = W(0,0) = \frac{1}{3} + \frac{2}{15} C_2^{00} \quad (3-97)$$

Les équations (3-84), (3-88), (3-89) montrent que l'on peut calculer les coefficients de KEARNS directement à partir des figures de pôles des axes \vec{c} . Les équations (3-95), (3-96), (3-97) montrent que l'on peut calculer les

coefficients de KEARNS en utilisant les coefficients C_l^{mn} de la F.D.O. d'ordre

2. Ce dernier point de vue nous semble le plus favorable pour cette détermination. En effet, la fonction de texture peut être calculée à l'aide de plusieurs figures de pôles incomplètes différentes. Par ailleurs la recherche de la fonction de texture à partir de figures de pôles expérimentales est un procédé analogue à la recherche d'un barycentre, procédé qui présente l'avantage de diminuer l'influence des erreurs statistiques sur le résultat final.

3-5-a Calcul du coefficient de KEARNS selon une direction arbitraire.

Connaissant les coefficients E_{DL}, E_{DT}, E_{DN} notés désormais E_L, E_T, E_N il est possible d'exprimer la déformation dans une direction $\vec{y}(\alpha, \beta)$ quelconque

$$E(\alpha, \beta) = (\cos \alpha_L, \cos \alpha_T, \cos \alpha_N) \begin{pmatrix} E_L & 0 & 0 \\ 0 & E_T & 0 \\ 0 & 0 & E_N \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \alpha_L \\ \cos \alpha_T \\ \cos \alpha_N \end{pmatrix} \quad (3-98)$$

avec

$$\begin{pmatrix} \cos \alpha_L = \sin \alpha \cos \beta \\ \cos \alpha_T = \sin \alpha \sin \beta \\ \cos \alpha_N = \cos \alpha \end{pmatrix}$$

il vient alors :

$$E(\alpha, \beta) = E_L \cos^2 \alpha_L + E_T \cos^2 \alpha_T + E_N \cos^2 \alpha_N \quad (3-99)$$

Les équations (3-85), (3-90) et (3-91) nous donnent les valeurs E_N, E_L, E_T en fonction des paramètres $F_L, F_T, F_N, \epsilon_a$ et ϵ_c :

$$E_L = F_L \epsilon_c + (1 - F_L) \epsilon_a \quad (3-100)$$

$$E_T = F_T \epsilon_c + (1 - F_T) \epsilon_a \quad (3-101)$$

$$E_N = F_N \epsilon_c + (1 - F_N) \epsilon_a \quad (3-102)$$

L'équation (3-99) devient :

$$E(\alpha, \beta) = F(\alpha, \beta) \epsilon_c + (1 - F(\alpha, \beta)) \epsilon_a \quad (3-103)$$

$$\text{avec } F(\alpha, \beta) = (F_L \cos^2 \alpha_L + F_T \cos^2 \alpha_T + F_N \cos^2 \alpha_N) \quad (3-104)$$

$F(\alpha, \beta)$ n'est autre que la fonction $W(\alpha, \beta)$.

3-6- VARIATIONS VOLUMIQUES

3-6-a- Variation volumique du cristallite.

Soit v_0 le volume cristallin initial d'un cristallite de Zircaloy avant irradiation.

Si on a une variation de volume Δv au cours de l'irradiation, la déformation volumique du cristallite est donnée par :

$$DV/V_0 = \epsilon_c + 2 \epsilon_a \quad (3-105)$$

Dans le cas de conservation de volume Δv est nulle, d'où :

$$\epsilon_c + 2 \epsilon_a = 0 \quad (3-106)$$

$$\epsilon_c = - 2 \epsilon_a \quad (3-107)$$

3-6-b. Variation volumique de l'échantillon.

Soit V_0 le volume initial de la tôle :

La déformation volumique moyenne de la tôle est donnée par :

$$\frac{\Delta V}{V_0} = E_L + E_T + E_N \quad (3-108)$$

3-6-c. Relation entre les déformations volumiques du cristal et de l'échantillon.

Il est évident que la déformation volumique moyenne de l'échantillon est égale à la déformation du cristallite individuel.

$$E_L + E_T + E_N = \epsilon_c + 2 \epsilon_a \quad (3-109)$$

3-7 SIGNIFICATION GEOMETRIQUE DES DEFORMATIONS PRINCIPALES

Pendant la déformation, on suppose que les axes principaux restent perpendiculaires entre eux, comme dans le cas de la dilatation thermique [5].

3-7-a. Signification géométrique des déformations principales du cristal.

Une sphère tracée dans le cristal, de centre l'origine du repère K_B lié au cristallite, devient un ellipsoïde (ellipsoïde des croissances) dont les axes sont proportionnels à : $(1 + \epsilon_a)$, $(1 + \epsilon_a)$ et $(1 + \epsilon_c)$ voir figure (3-15)

3-7-b- Signification géométrique des déformations principales de la tôle.

Une sphère tracée dans la tôle, de centre l'origine du repère K_A lié à la tôle, devient un ellipsoïde (ellipsoïde des croissances) dont les axes sont proportionnels à : $(1 + E_L)$, $(1 + E_T)$ et $(1 + E_N)$ voir figure (3-16).

3-8. COEFFICIENT DE CROISSANCE

Dans l'hypothèse de petites déformations, la conservation de volume du matériau est réalisée si ϵ_a et ϵ_c vérifient :

$$\epsilon_c = -2 \epsilon_a \quad (3-110)$$

L'équation (3-44) devient :

$$E(\alpha, \beta) = W(\alpha, \beta)(-2\epsilon_a) + (1 - W(\alpha, \beta)) \epsilon_a = (1 - 3W(\alpha, \beta)) \epsilon_a \quad (3-111)$$

Le coefficient de croissance $G(\alpha, \beta)$ est défini [9] comme le rapport de la déformation moyenne macroscopique $\bar{E}(\alpha, \beta)$ par la déformation ϵ_a du cristal individuel :

$$G(\alpha, \beta) = \frac{\bar{E}(\alpha, \beta)}{\epsilon_a} = 1 - 3W(\alpha, \beta) = 1 - 3f(\alpha, \beta) \quad (3-112)$$

La figure (3-17) montre la variation du coefficient de croissance $G(\alpha, \beta)$ en fonction du coefficient de KEARNS $f(\alpha, \beta)$.

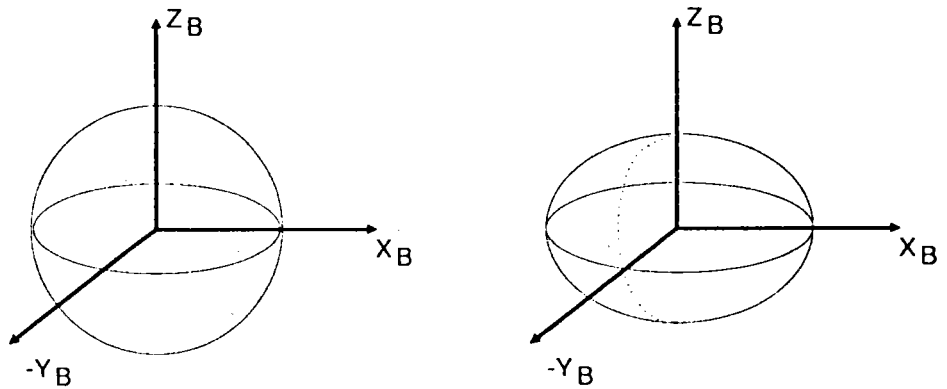


Fig. (3-15) : Déformation d'une sphère de centre l'origine du repère K_B , en ellipsoïde dont les axes sont proportionnels à : $(1 + \epsilon_a)$, $(1 + \epsilon_a)$ et $(1 + \epsilon_c)$.

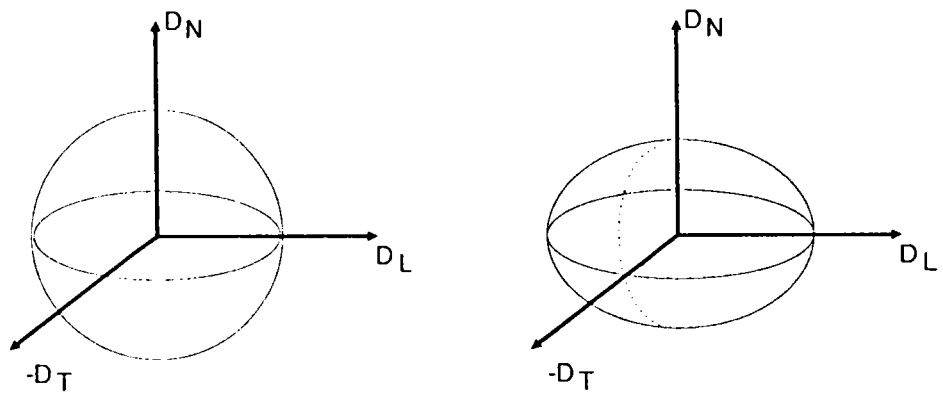


Fig. (3-16) : Déformation d'une sphère de centre l'origine du repère K_A , en un ellipsoïde dont les axes sont proportionnels à $(1 + E_L)$, $(1 + E_T)$ et $(1 + E_N)$

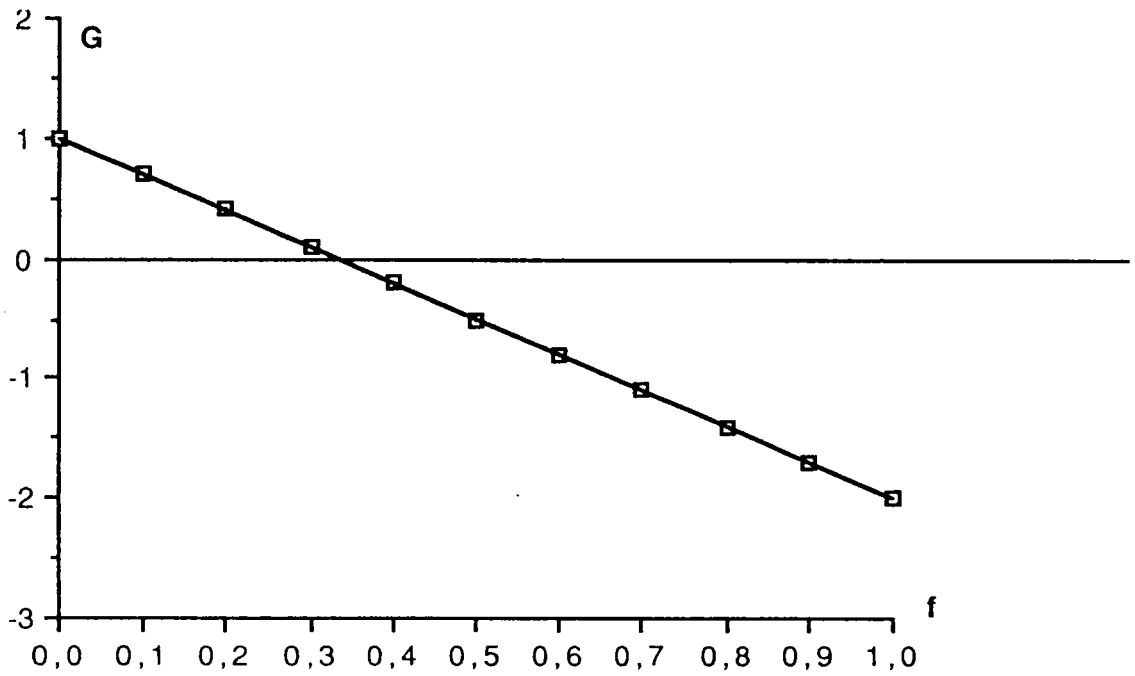


Fig. (3-17) : Variation du coefficient de croissance G en fonction ...
du coefficient de KEARNS f .

La somme des trois coefficients de croissance principaux d'une tôle selon le sens de laminage G_L , selon le sens transverse G_T , selon le sens normal G_N , est nulle :

$$G(90,0) + G(90,90) + G(0,0) = G_L + G_T + G_N = 0 \quad (3-113)$$

3-9- DETERMINATION DES DEFORMATIONS ϵ_a ET ϵ_c DU MONOCRISTAL

Les paramètres ϵ_a et ϵ_c qui rendent compte de la déformation anisotrope d'un volume monocristallin soumis à l'action prolongée d'un bombardement neutronique n'ont pas été jusqu'à présent déterminées directement. La détermination est réalisée de manière indirecte par la mesure dans certaines directions privilégiées de la déformation du matériau polycristallin dont la texture est connue avec précision.

A partir de la relation (3-44) qui représente les effets de croissance du polycristal, deux mesures de déformation et la fonction de densité des orientations suffisent, en théorie, à déterminer les paramètres ϵ_a et ϵ_c du monocristal. Toutefois, un plus grand nombre de mesures de déformations dans différentes directions de l'échantillon seraient extrêmement utiles, pour limiter les risques d'erreurs dans la détermination des grandeurs microscopiques.

Dans le cas de notre étude réalisée notamment sur un échantillon de ZrIL nous disposons de deux mesures de déformation, l'une dans la direction de laminage DL, l'autre dans la direction transverse DT. La F.D.O. a été déterminée sur ce même échantillon. En tenant compte des équations (3-95) et (3-96), la relation (3-44) a été exploitée sous la forme suivante :

$$E_L = F_L \epsilon_c + (1 - F_L) \epsilon_a \quad (3-114)$$

$$E_T = F_T \epsilon_c + (1 - F_T) \epsilon_a \quad (3-115)$$

Par inversion du système d'équations (3-114) et (3-115) on obtient l'expression des paramètres ϵ_a, ϵ_c :

$$\epsilon_a = \frac{F_L E_L - F_T E_T}{F_L - F_T} \quad (3-116)$$

$$\epsilon_c = \frac{(1 - F_T) E_L - (1 - F_L) E_T}{F_L - F_T} = \frac{E_L - E_T}{F_L - F_T} + \epsilon_a \quad (3-117)$$

3-10 DETERMINATION DES DEFORMATIONS MONOCRISTALLINES DANS LE CAS DE CONSERVATION DE VOLUME.

Dans le cas où il y a conservation de volume, les équations (3-95) et (3-96) selon le sens long et le sens transverse, deviennent :

$$E_L = (1 - 3 F_L) \epsilon_a \quad (3-118)$$

$$E_T = (1 - 3 F_T) \epsilon_a \quad (3-119)$$

$$\epsilon_a = \frac{E_L}{1 - 3 F_L} = \frac{E_T}{1 - 3 F_T} \quad (3-120)$$

Sauf cas très rares, ϵ_a n'est pas exactement la solution de l'équation (3-120) en raison des erreurs de mesure sur E_L et E_T . La valeur ϵ_a est alors calculée par une technique de moindres carrés :

$$M = [E_L - (1 - 3 F_L) \epsilon_a]^2 + [E_T - (1 - 3 F_T) \epsilon_a]^2 = \text{minimum} \quad (3-121)$$

$$\frac{\partial M}{\partial \epsilon_a} = -2(1 - 3 F_L) [E_L - (1 - 3 F_L) \epsilon_a] - 2(1 - 3 F_T) [E_T - (1 - 3 F_T) \epsilon_a] = 0$$

$$(3-122)$$

$$\varepsilon_a = \frac{E_L(1 - 3 F_L) + E_T(1 - 3 F_T)}{(1 - 3 F_L)^2 + (1 - 3 F_T)^2} \quad (3-123)$$

Cette valeur de ε_a réintroduite dans les équations (3-118) et (3-119) permet d'évaluer l'écart entre les valeurs mesurées et les valeurs calculées.

$$\delta E_L = E_L - \frac{E_L(1-3 F_L)^2 + E_T(1-3 F_T)(1-3 F_T)}{(1-3 F_L)^2 + (1-3 F_T)^2} = \frac{E_L(1-3 F_T)^2 - E_T(1-3 F_T)(1-3 F_L)}{(1-3 F_L)^2 + (1-3 F_T)^2} \quad (3-124)$$

$$\delta E_T = E_T - \frac{E_L(1-3 F_L)(1-3 F_T) + E_T(1-3 F_T)^2}{(1-3 F_L)^2 + (1-3 F_T)^2} = \frac{E_T(1-3 F_L)^2 - E_L(1-3 F_T)(1-3 F_L)}{(1-3 F_L)^2 + (1-3 F_T)^2} \quad (3-125)$$

Si les valeurs δE_L et δE_T sont faibles vis à vis des erreurs expérimentales de détermination de E_L et E_T , l'hypothèse de conservation de volume demeure plausible.

3-11 - CONCLUSION :

L'équation (3-12) constitue le cadre général du calcul des grandeurs uniaxiales moyennes, mais requiert bien entendu l'adaptation aux symétries du cristallite et de l'échantillon.

Le modèle prédictif de la croissance qui a été établi, n'est en fait qu'un cas particulier de la formule générale équation (3-12), où :

- La symétrie du cristallite est hexagonale (Zircaloy-4).
- La symétrie d'échantillon est orthorhombique (tôle laminée).
- La propriété physique considérée "La croissance" est supposée être de rang deux, ce qui limite la série au rang $L_{MAX} = 2$.

Ce modèle peut être aussi utilisé pour la croissance des tubes de Zircaloy qui doivent être amincis pour pouvoir être "déroulés" sans quitter le domaine de déformation élastique afin que les directions principales du cylindre coïncident avec celles de la tôle.

Dans le modèle qu'on a établi la déformation moyenne est calculée à partir des coefficients de texture C_l^{mn} qui caractérisent la F.D.O.

On peut faire apparaître dans ce calcul les coefficients d'anisotropie F_i appelés encore coefficients de Kearns qui peuvent être calculés à partir de la figure de pôles complète (0001). Dans notre étude, les coefficients de

Kearns ont été calculés à l'aide des coefficients de la F.D.O. C_l^{mn} d'ordre 2. Ces résultats sont de meilleures qualités en raison même du principe de calcul. En effet, la détermination de la F.D.O. à partir de différentes figures de pôles expérimentales est un procédé analogue à la recherche d'un barycentre, procédé qui présente l'avantage de diminuer l'influence des erreurs statistiques sur le résultat final.

On peut aussi faire apparaître des coefficients d'anisotropie pour le calcul de déformation dans une direction particulière. Ces coefficients correspondent à la fonction $W(\alpha, \beta)$.

REFERENCES DU TROISIEME CHAPITRE

- [1] H.J. BUNGE, "Mathematische Methoden der Texture analyse"
Akademie- Verlag (1969)
- [2] H.J. BUNGE and C.ESLING "Quantitative Texture analysis"
D.G.M. 1982.
- [3] H.J.BUNGE "Texture analysis in materials science"
Butterworths 1982.
- [4] H.J. BUNGE "Directionnal properties of Materials"
D.G.M. 1988.
- [5] J.F. NYE "Physical properties of crystals" Oxford, The claredon Press,
1957.
- [6] R. PENELLE "Les figures de pôles directes et inverses, leurs
limitations, introduction et intérêt de la représentation
tridimensionnelles des Textures" 3ème colloque européen sur les
Textures de déformations et de recristallisation et leurs applications
industrielles. Pont-à-Mousson France 1973.
- [7] G.J. DAVIES, D.J. GOODWILL and J.S. KALLEND "Met Trans" 3(1972)
1627.
- [8] M.PERNOT, R. PENELLE and P.LACOMBE "The influence of O.D.F. on the
magnetocrystalline anisotropy of a rimmed steel thin sheet" Comm.
congrès "Soft magnetic materials" Turin, septembre 1973.
- [9] R.V. HESKETH, J.E. HARBOTTLE, N.A. WATERMAN and R.C. LOBB, in
"Radiation Damage in Reactor Materials"(IAEA, Vienna, 1962) p.365.
- [10] M. HUMBERT et C. ESLING Rapport de fin de contrat
n° T.F. IDA 87/3978
- [11] M. HUMBERT et C. ESLING "Modélisation de la croissance sous
irradiation de tubes en Zircaloy - 4" T.F. IDA /89/179.
- [12] C. ESLING "Thèse d'état" Université de Metz 1981

- [13] J. LENSE : Kugel funktionen, Akademische Verlagsgesellschaft, Geest U. Portig Leizig 1954.
- [14] D. HOFSSOMMER and M.L. POTTERS : Table of FOURIER coefficient of associated Legendre functions, Indag Math. 22 (1962) 460-480.
- [15] Y. SIROTINE et M. CHASKOLSKAIA, "Fondement de la physique des cristaux" Edition Mir, Moscou
- [16] P. COULOMB, "Les Textures dans les métaux de réseau cubique" Dunod Paris 1972.
- [17] G. LINSSEN, H.D. MENGELBERG and H.P. STÜWE (1964).
Zyklische Texturen in Drähten Kubisch.
Flächenzentrierter Metalle -Z-Metallkde. 55, 600-604.
- [18] A. KUROSH "Cours d'algèbre supérieur" Edition Mir Moscou 1971.
- [19] MURRAY. R. SPIEGEL "Théorie et application de l'analyse"
Série SCHAUM- Paris.
- [20] J.J. KEARNS "Thermal Expansion and preferred orientation in Zircaloy" WAPD -TM-472 (1965)
- [21] P.A. TEMPEST "Preferred orientation and its effect on bulk physical properties of hexagonal polycrystalline materials" Journal of Nuclear Materials 92 (1980) 191-200-North-Holland Publishing compagny.

CHAPITRE IV
RESULTATS EXPERIMENTAUX

4-1. INTRODUCTION

4-2. ANALYSE DES TEXTURES.

4-2-a Désignation des échantillons.

4-2-b Préparation des échantillons

1) Polissage mécanique

a) Prépolissage.

b) Polissage au diamant.

2) Attaque chimique.

4-2-c Mesures des figures de pôles.

4-2-d Réglages des fentes du compteur

1) phénomène de défocalisation

2) calcul de l'atténuation due au phénomène de défocalisation

3) écartement des fentes horizontales du compteur

4) conditions expérimentales.

4-3. DETERMINATION DE LA FONCTION DE TEXTURE

4-4- RESULTATS.

4-4-a Figures de pôles expérimentales incomplètes.

4-4-b Fonctions de textures.

4-4-c Figures de pôles recalculées.

4-4-d Indice et coefficients de texture.

4-5 CALCUL DES COEFFICIENTS DE KEARNS.

4-6 CALCUL DES DEFORMATIONS.

- 4-6-a Calcul des déformations du monocristal
 - 1) Dans le cas de variation de volume.
 - 2) Dans le cas de conservation de volume.

- 4-6-b Variation de la déformation de l'échantillon ZrIL dans les trois plans principaux de la tôle.

- 4-6-c Calcul prévisionnel des déformations macroscopiques attribuées aux autres matériaux.
 - 1) Dans le cas de variation de volume.
 - 2) Dans le cas de conservation de volume.

- 4-6-d Commentaires sur les résultats.

- 4-7 COEFFICIENT DE CROISSANCE.

- 4-8 CALCUL DES EXTREMA DE LA DEFORMATION MACROSCOPIQUE

- 4-9 VARIATION DE LA DEFORMATION VOLUMIQUE EN FONCTION DE LA FLUENCE.

- 4-10 CONCLUSION

4-1 INTRODUCTION.

On a vu dans le chapitre précédent qu'il est préférable d' utiliser les coefficients de texture C_2^{00} et C_2^{02} du développement en série de la fonction de texture pour calculer les coefficients de KEARNS qui nous permettent ensuite d'estimer les déformations du cristallite et les déformations macroscopiques suivant n'importe quelle direction de l'échantillon. Une analyse de texture nous est donc nécessaire pour pouvoir déterminer les coefficients de texture C_l^{mn} considérés.

4-2- ANALYSE DES TEXTURES.

4-2-a- Désignation des échantillons.

Les échantillons qui nous sont parvenus ont été repérés conformément aux codes suivants :

- 1) feuillard ayant servi aux mesures d'irradiation est noté : ZrIL.
- 2) feuillard d'épaisseur 0,4 mm pour vérification éventuelle est noté : ZrVL.
- 3) feuillard 0,6 mm de texture type 2 (comportement inconnu) 3, est noté : Zr236.
- 4) feuillard 0,4 mm de texture type 2 (comportement inconnu) est noté : Zr 2.4.
- 5) feuillard 0,6 mm type 2 est noté : Zr 2.6.

5 échantillons désignés par : ZR.IL
ZR.VL
ZR.24
ZR236
ZR26

ont été analysés.

4-2-b- Préparation des échantillons.

En vue de se mettre dans les meilleures conditions pour la diffraction de rayons X les échantillons ont dû subir les opérations de polissage suivants :

1) Polissage mécanique.

a) prépolissage :

Le prépolissage a été fait sur des papiers abrasifs type STRUERS.

Les disques abrasifs utilisés sont :

100 ; 320 ; 600 ; 1000 et 1200.

b) polissage au diamant.

Le polissage a été fait sur des disques de polissage autocollants. Les pâtes diamantées sont de granulométrie 3 μ et 1 μ .

2) Attaque chimique :

Le réactif est composé par : 5% d'acide fluorhydrique.

45% d'acide nitrique.

50 % d'eau distillée.

4-2-c Mesures des figures de pôles.

Pour déterminer la fonction de distribution des orientations de chaque échantillon nous avons mesuré quatre figures de pôles :

$(10\bar{1}2)$, $(10\bar{1}1)$, (0002) et $(10\bar{1}0)$ par diffraction de rayons X grâce à un goniomètre de texture piloté par ordinateur et conçu au laboratoire.

En principe pour une orientation fixée de l'échantillon le nombre de photons X recueillis par le compteur est proportionnel à la densité de plans réticulaires en position de diffraction. Toutefois, un certain nombre de facteurs géométriques d'une part ou inhérents à la diffraction d'autre part viennent perturber cette mesure. Il est donc nécessaire par un choix convenable des paramètres de réglage du goniomètre de minimiser ces effets et de corriger les valeurs expérimentales de leur influence.

Pour effectuer ces corrections il est nécessaire en particulier d'estimer la valeur du rayonnement parasite communément appelé fond continu.

Cette estimation est en fait une opération délicate qui requiert des mesures de diffraction hors des conditions normales de Bragg.

Une sous-estimation du fond continu a pour effet de réduire l'acuité apparente de la texture alors qu'une sur-estimation l'augmente artificiellement. Cet effet pourra être observé dans tous les tableaux qui présentent systématiquement les résultats obtenus avec et sans correction de fond continu.

En modifiant l'écartement 'L' des fentes verticales, il est possible, sans altérer l'information utile, d'évaluer la valeur du fond continu. La soustraction du fond continu [19] est effectuée analytiquement par un programme calculant les coefficients du développement en série de l'intensité sur la base des harmoniques sphériques (chapitre II).

4-2-d- Réglage des fentes du compteur

1) Phénomène de défocalisation.

La défocalisation correspond à une chute importante de l'intensité mesurée, due à une variation de la géométrie du faisceau diffracté, et dépend étroitement de la valeur des angles de Bragg utilisés [4].

La méthode de Schulz en réflexion [5] (voir figure 2-17) ne permet pas d'obtenir une figure de pôle complète puisque le domaine étudié en réflexion est limité par le phénomène de défocalisation [6].

La défocalisation provoque un élargissement du faisceau diffracté.

A partir d'une valeur ϕ_1 de la déclinaison voisine de 60° , le faisceau diffracté devient plus large que les fentes verticales du compteur qui ne recueille plus l'intensité totale diffractée [7,8,9].

Les renseignements fournis par une figure de pôles non corrigée pour les valeurs de ϕ supérieurs à 60° ne sont pas pour autant inutiles, car ils permettent de déterminer la position des maxima de diffraction et par voie de conséquence, de déterminer les orientations préférentielles les plus importantes [10].

Pour améliorer la qualité de l'analyse il est nécessaire d'effectuer la correction de défocalisation sur les intensités recueillies par le compteur.

Un certain nombre d'auteurs propose d'effectuer des corrections d'intensité en se rapportant à la courbe d'intensité diffractée par un échantillon isotrope [11,12,13], d'autres proposent une correction analytique de l'intensité diffractée lorsque l'on ne possède pas d'échantillon sans texture [9,6,14]. HUMBERT [15] a proposé une méthode de

calcul de la largeur L du faisceau diffracté en fonction de la déclinaison ϕ de l'échantillon, quelle que soit la section du faisceau de rayons X incidents. Cette dernière méthode de calcul utilise un formalisme matriciel de grande souplesse.

2) Calcul de l'atténuation due au phénomène de défocalisation.

Cas de faisceau de section rectangulaire.

Il n'y a pas d'atténuation de l'intensité recueillie par le compteur tant que la largeur L du faisceau diffracté reste inférieur à l'écartement L des fentes verticales du compteur.

Lorsque L devient supérieur à L , la mesure est perturbée.

L'atténuation est dans le rapport de la surface irradiée vue du compteur sur la surface totale irradiée.

L'expression de la largeur L du faisceau diffracté en fonction de la déclinaison ϕ est donnée par [15] :

$$L = l + 2 h \cos \theta \cot g \left(\frac{\pi}{2} - \phi \right) \quad (4-1)$$

θ est l'angle de Bragg.

ϕ la déclinaison.

l la petite section de la surface irradiée de l'échantillon par le faisceau de rayon X incident (vue du compteur).

h la hauteur de la surface irradiée (vue du compteur).

Deux cas se présentent (fig.4-1-a et fig. 4-1-b).

$$L \leq l + 2 h \cos \theta \cot g \left(\frac{\pi}{2} - \phi \right) \leq L + 2 l \quad (4-2)$$

1er cas : $L \leq L$ (fig. 4-1-a) :

L'atténuation "A" est donnée par :

$$A = 1 - \frac{(2 \Delta + l - L)^2}{8 l \Delta} \quad (4-3)$$

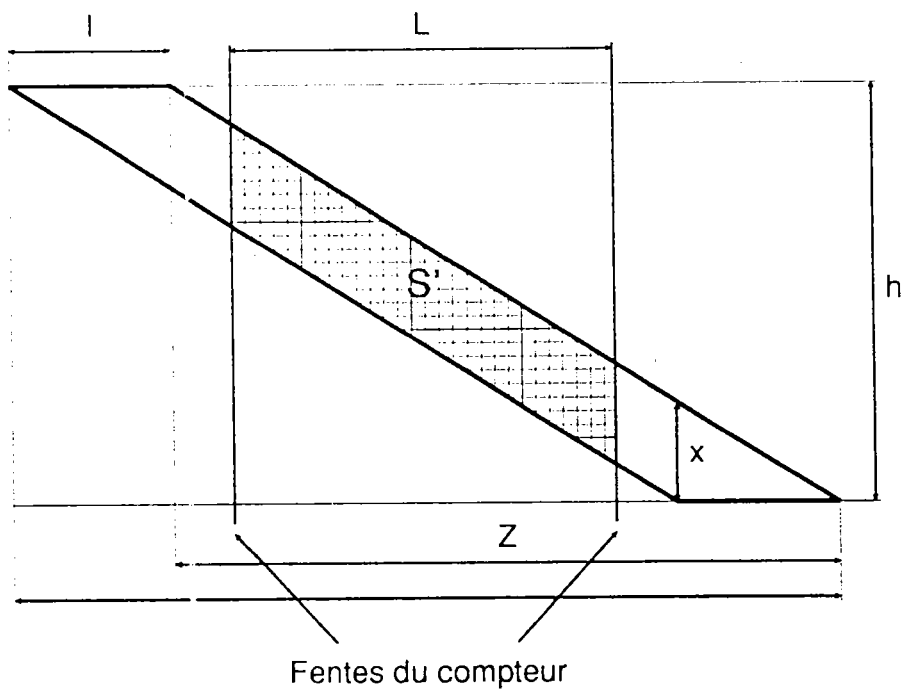
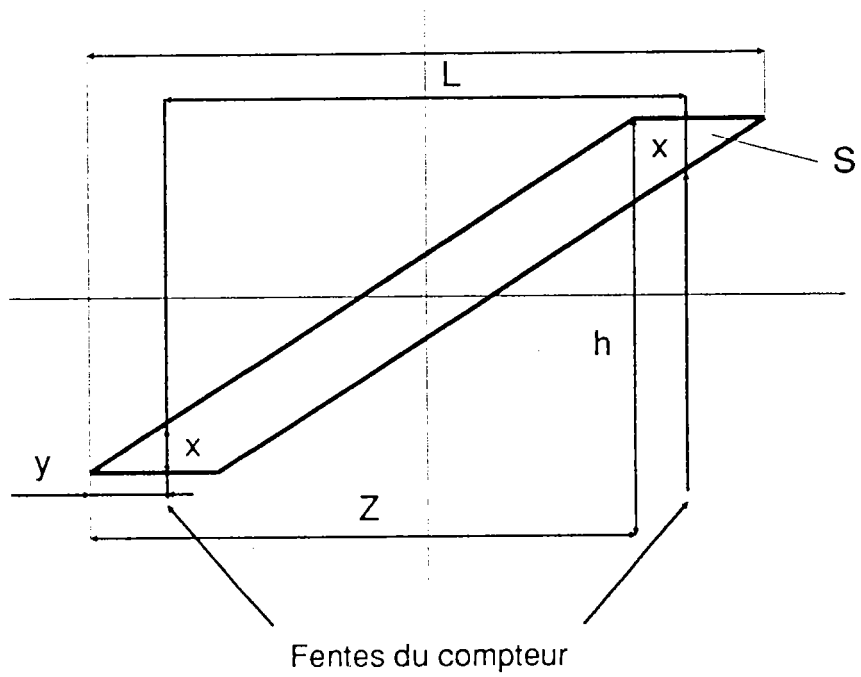


Fig. (4-1) : a) Largeur l du faisceau diffracté inférieur à l'écartement L
 b) Largeur l du faisceau diffracté supérieur à l'écartement L

avec

$$\Delta = h \cos \theta \cot g \left(\frac{\pi}{2} - \phi \right) \quad (4-4)$$

2ème cas : $L \leq L + 2 l$ (fig 4-1-b).

L'atténuation a pour expression :

$$A = \frac{L}{2 \Delta} \quad (4-5)$$

3) Ecartement des fentes horizontales du compteur.

L'écartement H des fentes horizontales du compteur permet la mesure de la densité moyenne des pôles {hkl} dont la déclinaison est comprise entre $\phi - \frac{\Delta\phi}{2}$ et $\phi + \frac{\Delta\phi}{2}$ (fig.(4-2)).

Le goniomètre de texture explore la sphère des pôles par couronnes de pas constant $\Delta\phi$.

La largeur de la couronne $\Delta\phi$ est déterminée par l'écartement H des fentes horizontales du compteur [15] :

$$H = 2 R \sin \theta \Delta\phi \quad (4-6)$$

R est la distance du centre de l'échantillon au compteur.

$\Delta\phi$ est la largeur de la couronne sur la sphère de pôle.

Si la valeur de H est trop grande ou trop faible, une erreur apparaît dans la détermination des coefficients $F_1^n(h)$ définis dans le chapitre II, due au fait qu'une partie des couronnes se recouvrent, ou respectivement, que les couronnes sont disjointes.

Pour limiter ces erreurs, on prendra le plus grand soin dans le réglage des fentes horizontales du compteur.

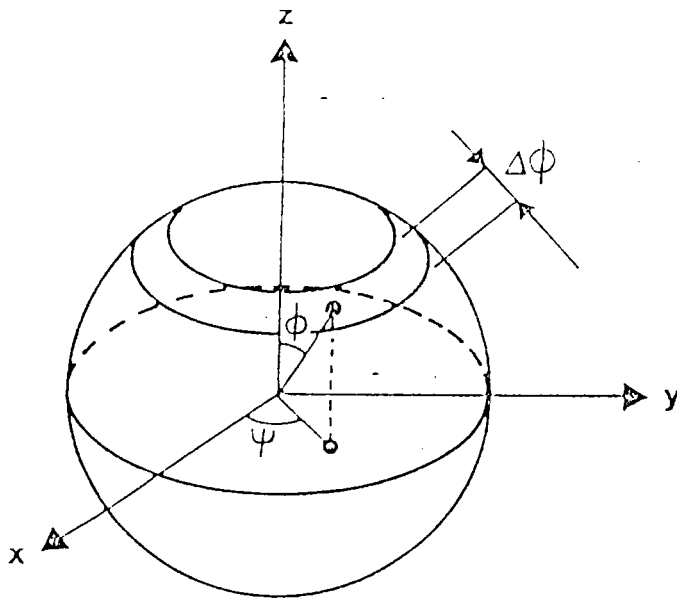


Fig. (4-2) : Zone explorée sur la sphère des pôles

4) Conditions expérimentales.

Les réglages de l'écartement H des fentes horizontales et de l'écartement L des fentes verticales du compteur ainsi que les angles de Bragg relatifs à chaque figure de pôles sont détaillés dans le tableau (4-1). Ces réglages permettent de séparer deux raies de diffraction voisines, de couvrir la sphère des pôles par des couronnes de $2,5^\circ$ et de rejeter les phénomènes de défocalisation à des angles de déclinaison supérieurs à 75° .

Nous avons été conduits à choisir pour les mesures des figures de pôles les conditions expérimentales suivantes :

- raie K_α du cuivre.
- diamètre du collimateur source 0,5 mm.
- translation de l'échantillon (± 3 mm) en vue d'une meilleure statistique sur le nombre de grains irradiés.
- angle de déclinaison maximum 80° .
- pas azimutal : $\Delta\psi = 5^\circ$.
- pas en déclinaison : $\Delta\phi = 2,5^\circ$.

FDP	H (mm)	L (mm)	2θ
10.0	6.01	4	$31^{\circ}99$
00.2	6.54	4	$34^{\circ}87$
10.1	6.84	4	$36^{\circ}54$
10.2	8	4	$48^{\circ}04$

Tableau (4-1) : Ecartement des fentes (H et L) relatifs à chaque FDP

4-3- DETERMINATION DE LA FONCTION DE TEXTURE.

Nous avons calculé la fonction de texture relative à chaque échantillon par la méthode des figures de pôles incomplètes [16]. Cette méthode donne des résultats équivalents et dans bien des cas meilleurs que ceux fournis par les méthodes de figures complètes [13,17,18,19] qui nécessitent de réaliser une partie des mesures de diffraction en transmission [20,21]. Pour ces mesures, il est nécessaire d'effectuer des corrections délicates et des ajustements de normes qui conduisent souvent à des erreurs importantes.

Dans le cadre de ce travail, les fonctions de texture ont été développées en série jusqu'à un rang égal à 16.

4-4- RESULTATS

L'ensemble des résultats est présenté sous forme de figures et de tableaux.

Pour l'interprétation des figures de pôles de l'axe \vec{c} , on utilise les figures de pôles expérimentales (incomplètes) puisque l'essentiel des informations n'est pas loin du centre de la figure de pôles.

L'essentiel des informations de la figure de pôles de l'axe \vec{a} se trouve proche de la périphérie de la figure de pôles donc on utilisera pour l'interprétation de telles figures de pôles des figures de pôles recalculées.

4-4-a. Figures de pôles expérimentales incomplètes.

Figures de pôles incomplètes des axes \vec{c}

Suivant les échantillons les figures de pôles des axes \vec{c} présentent des maxima soit dans le sens long, soit dans le sens travers et diversement éloignés de la direction normale, le tableau (4-2) rend compte de ces caractéristiques, voir les figures de (4-3) à (4-7).

Figures de pôles incomplètes des axes \vec{a}

Les maxima des figures de pôles des axes \vec{a} n'apparaissent pas sur les figures de pôles expérimentales incomplètes. Pour l'interprétation de telles figures on utilisera les figures de pôles recalculées.

ECHANTILLON	POSITION DES MAXIMA	ELOIGNEMENT
ZR IL	Sens long	18°
ZR VL	Sens travers	31°
ZR 24	Sens travers	33°
ZR 26	Sens travers	31°
ZR 236	Sens travers	31°

Tableau (4-2) : Position des maxima des axes \vec{c} de différents échantillons

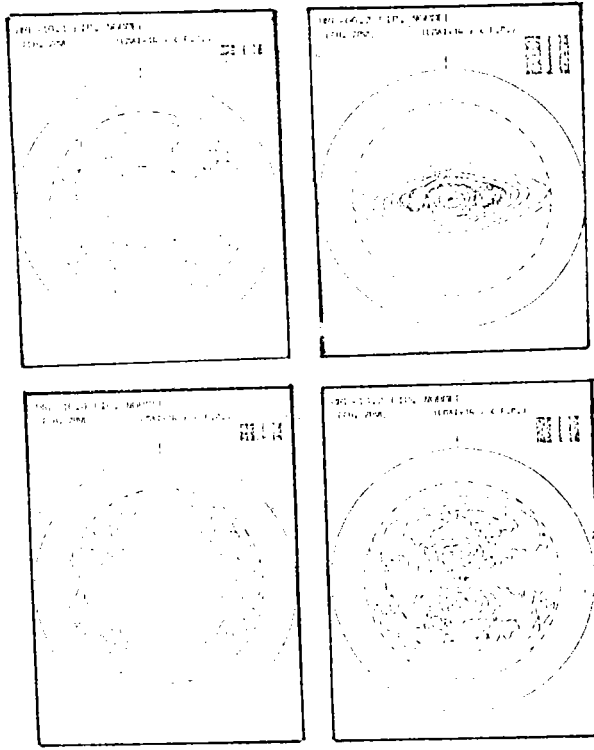


Fig. (4-4) : figures de pôles expérimentales de l'échantillon Zr VL.

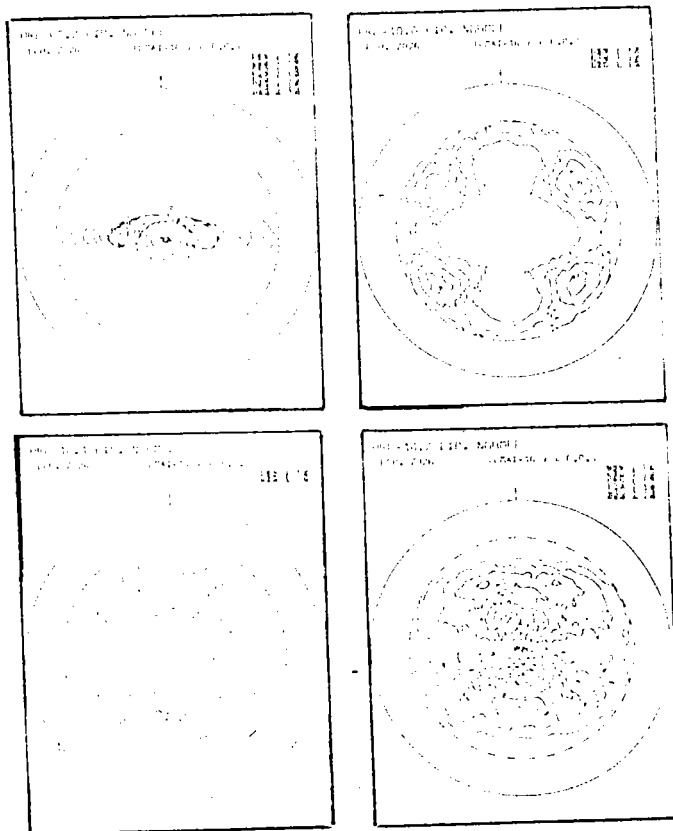


Fig. (4-5) : figures de pôles expérimentales de l'échantillon Zr 26.

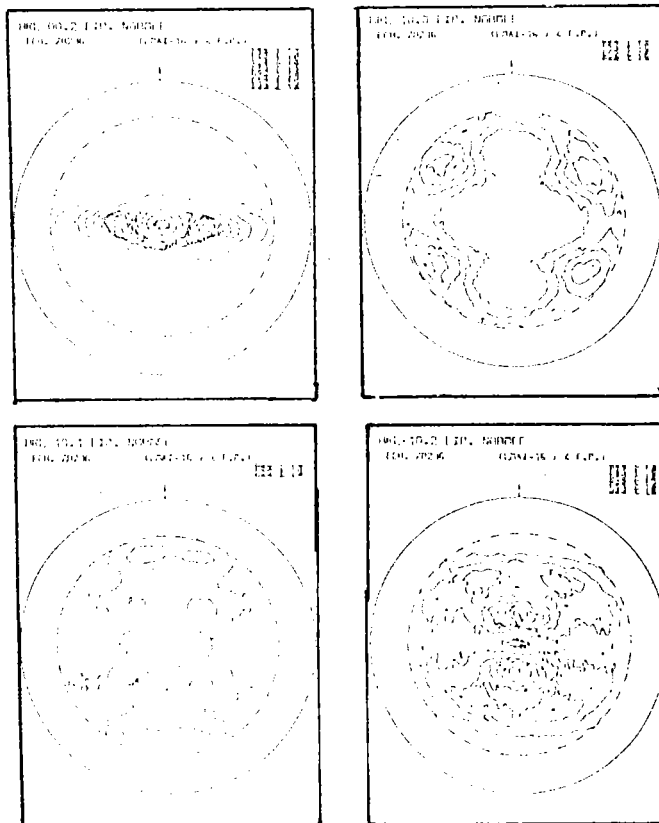


Fig. (4-6) : figures de pôles expérimentales de l'échantillon Zr 236.

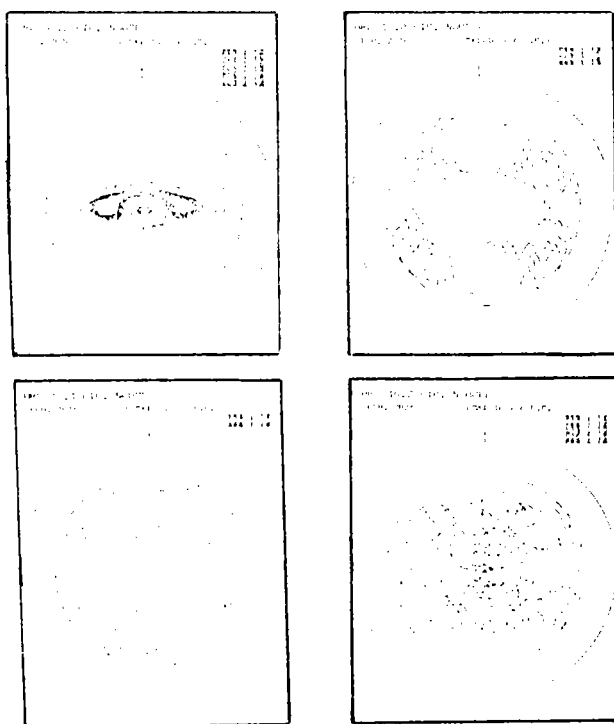


Fig. (4-7) : figures de pôles expérimentales de l'échantillon Zr 24.

4-4-b Fonctions de Texture :

Les densités d'orientations sont définies pour chaque triplet d'angle d'Euler. Elles sont représentées traditionnellement par des lignes d'isodensité sur des coupes où l'un des angles est maintenu constant [1,2,3].

Pour l'échantillon ZrIL, on a une texture de fibre définie par :

$$\varphi_1 = 90^\circ \text{ et } \phi = 18^\circ$$

Les maxima des axes \vec{c} se trouvent dans le plan (DN,DL) basculés de 18° de DN.

Les maxima des axes \vec{a} sont suivant la direction de laminage.

Pour les autres échantillons, on a une orientation préférentielle définie par :

$$\varphi_1 = 0^\circ \quad \phi = 30^\circ \text{ et } \varphi_2 = 0^\circ$$

Les maxima des axes \vec{c} se trouvent dans le plan (DN,DT) basculés de 30° de DN.

Les maxima des axes \vec{a} sont selon la direction de laminage.

Voir les figures (4-8) à (4-12).

*** ATEXINCS2 ECH ZRIL -4 F.P. LMAX=16 FIMAX=75 DEG.***

ECH: ZRIL -4 F.P. COMP. LMAX=16 - FI1=0,359,20 F(G) PAIRE

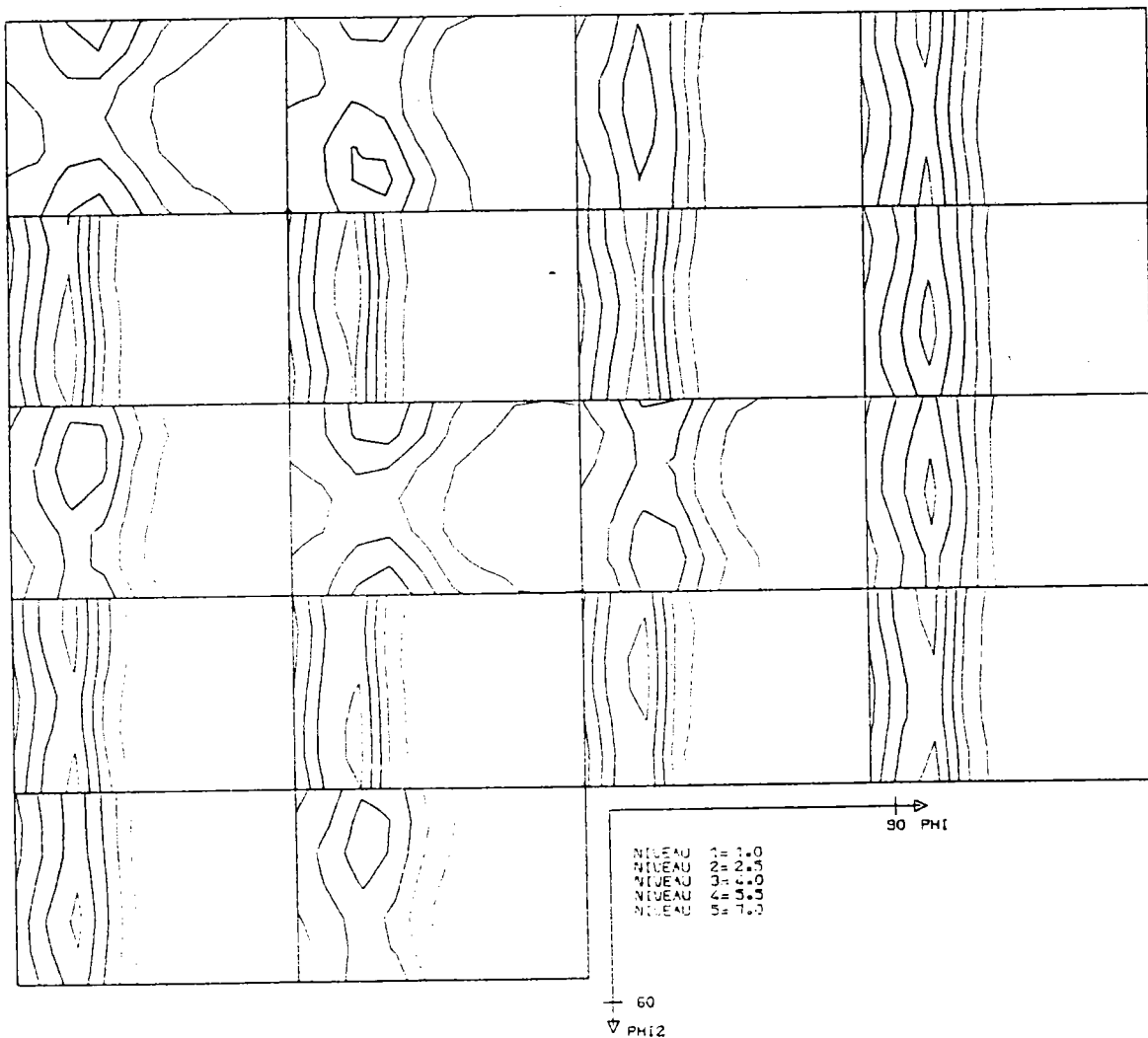


Fig. (4-8) : Fonction de texture de l'échantillon Zr IL.

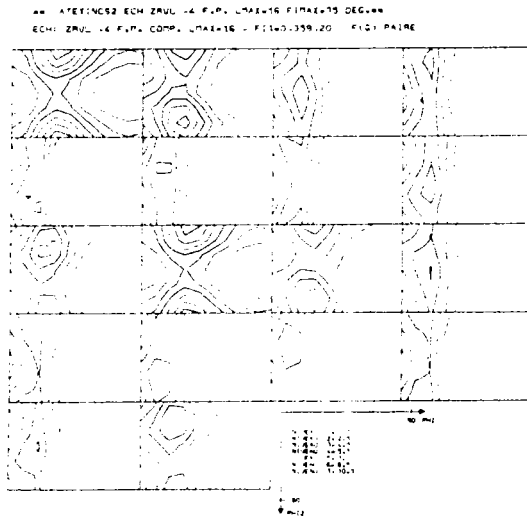


Fig. (4-9) : Fonction de texture de l'échantillon Zr VL.

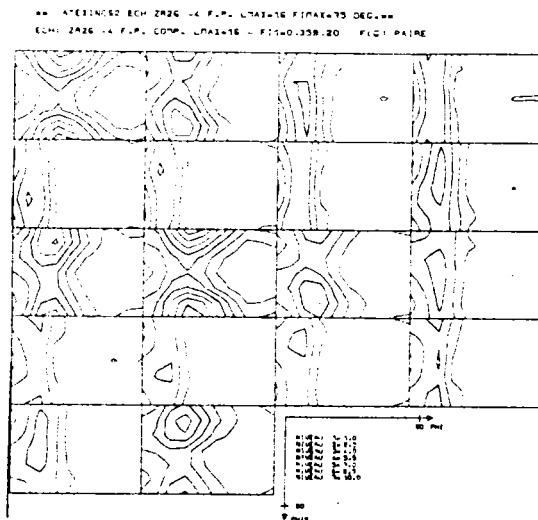


Fig. (4-10) : Fonction de texture de l'échantillon Zr 26.

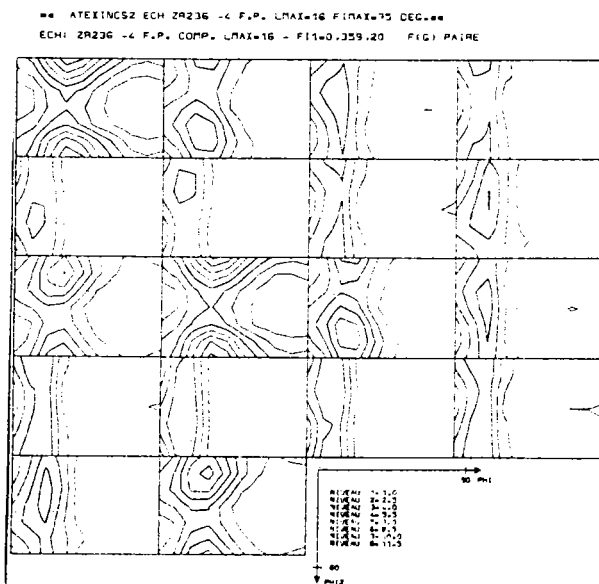


Fig. (4-11) : Fonction de texture de l'échantillon Zr 236.

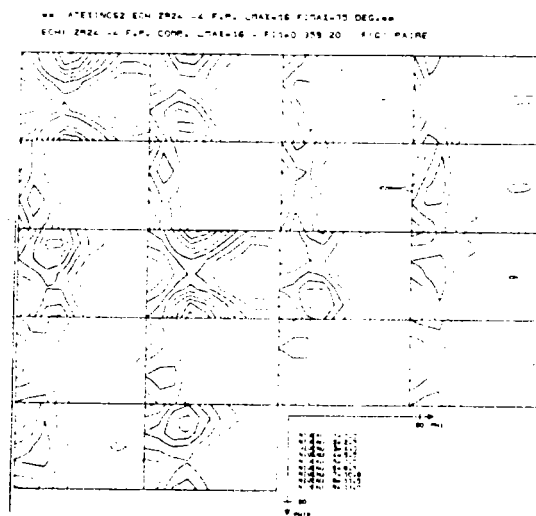


Fig. (4-12) : Fonction de texture de l'échantillon Zr 24.

4-4-c. Figures de pôles recalculées.

Par ailleurs, connaissant la fonction de densité des orientations, les figures de pôles ont été recalculées et sont présentées par les figures (4-13) à (4-17).

L'écart entre les figures de pôles expérimentales et recalculées donne des indications sur la précision de la détermination des textures.

Figures de pôles recalculées de l'axe \vec{a}

Suivant les échantillons les figures de pôles des axes \vec{a} présentent des maxima dans le sens de laminage.

Figures de pôles recalculées de l'axe \vec{c}

Les maxima des figures de pôles recalculées et expérimentales des axes \vec{c} sont presque les mêmes.

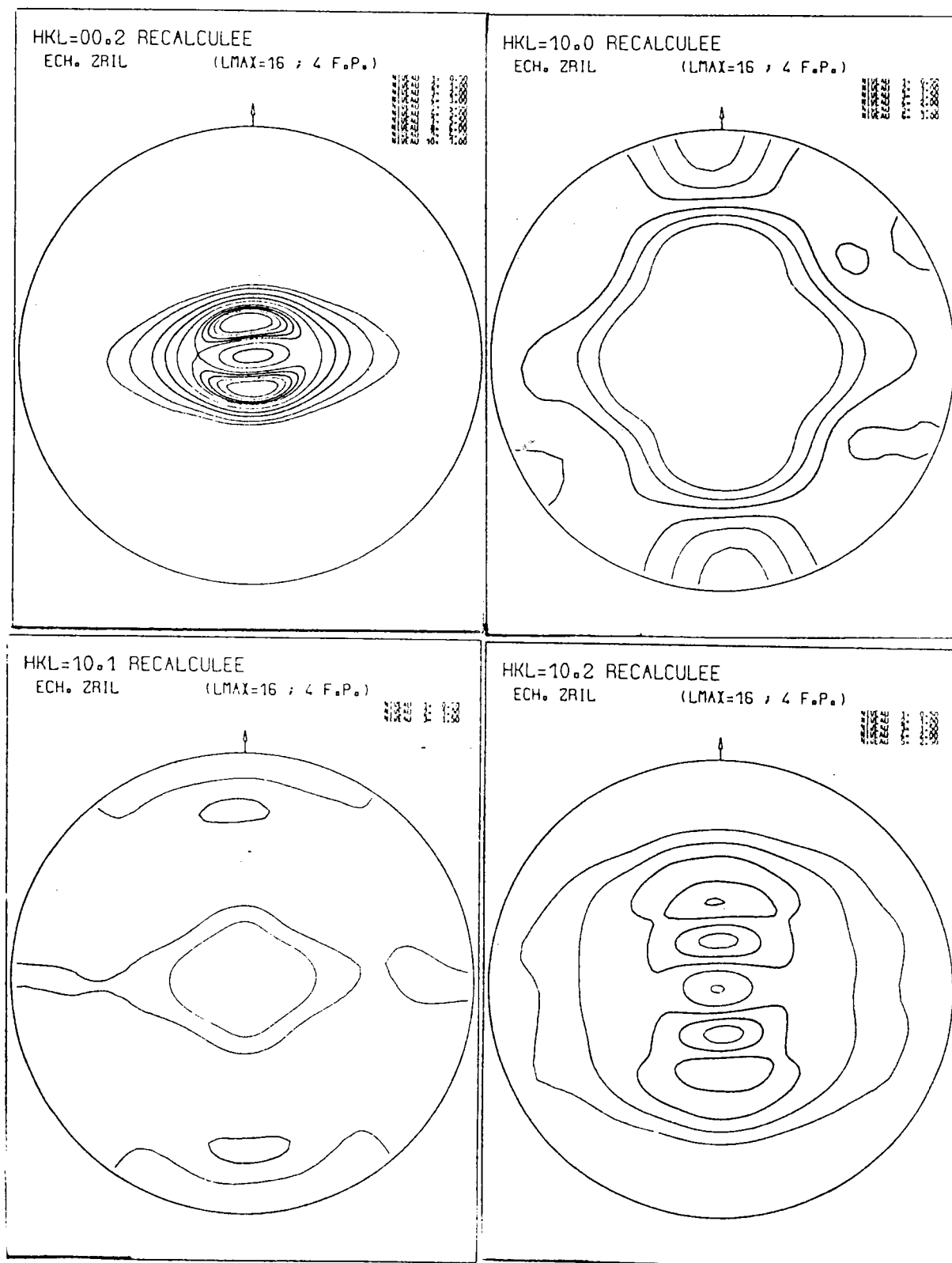


Fig. (4-13) : figures de pôles recalculées de l'échantillon Zr IL.

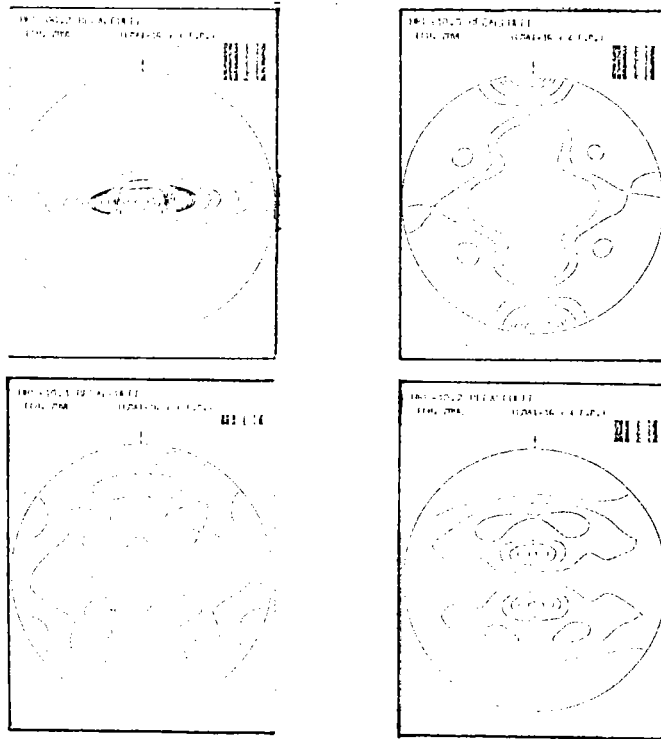


Fig. (4-14) : figures de pôles recalculées
de l'échantillon Zr VL.

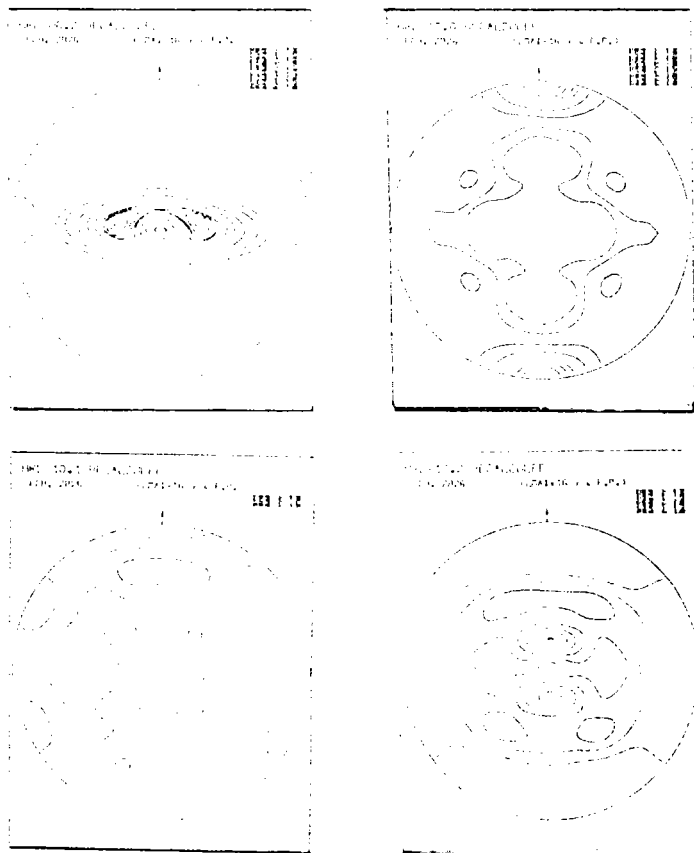


Fig. (4-15) : figures de pôles recalculées
de l'échantillon Zr 26.

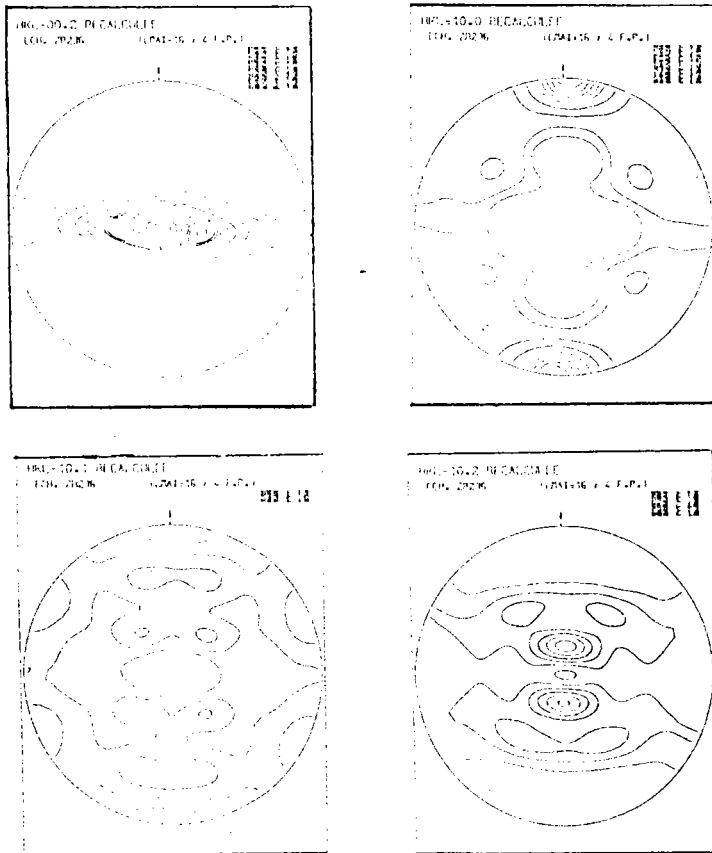


Fig. (4-16) : figures de pôles recalculées de l'échantillon Zr 236.

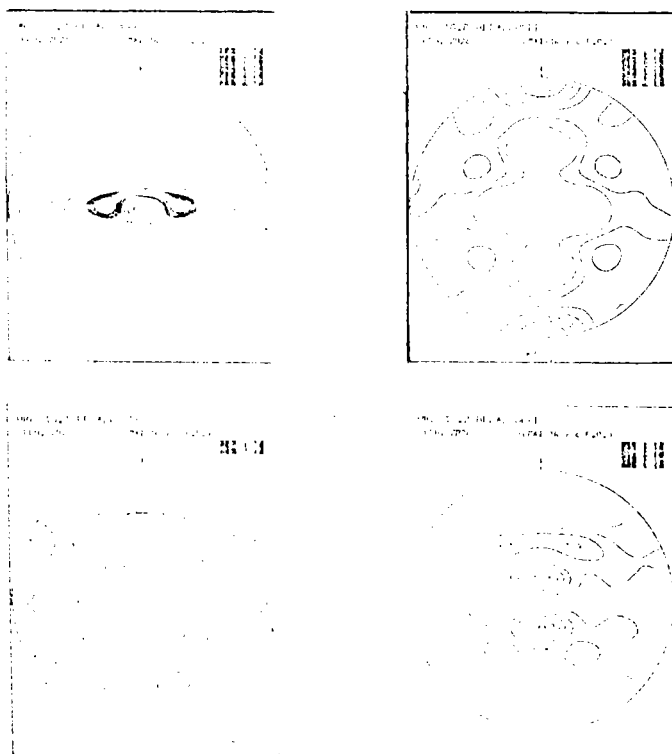


Fig. (4-17) : figures de pôles recalculées de l'échantillon Zr 24.

4-4-d. Indice et coefficients de texture :

Les indices de Texture J, qui sont des mesures de l'acuité des textures sont définis par la relation suivante [1, 23, 23] :

$$J = \oint [f(g)]^2 dg \quad (4-7)$$

Si on remplace f(g) par son développement en série, on obtient :

$$J = \sum_{l, \mu, \nu} \sum_{l', \mu', \nu'} C_1^{\mu\nu} C_1^{\mu'\nu'} \oint \ddot{T}_1^{\mu\nu}(g) \ddot{T}_1^{*\mu'\nu'}(g) dg \quad (4-8)$$

Grâce à l'orthogonalité des harmoniques sphériques généralisées, on aura :

$$J = \sum_{l, \mu, \nu} \frac{1}{2l+1} |C_1^{\mu\nu}|^2 \quad (4-9)$$

Les indices de Texture J des différents échantillons sont représentés dans le tableau (4-3).

Les coefficients C_2^{00} et $\text{Re } C_2^{02}$, nécessaires au calcul des coefficients de Kearns et des déformations, sont représentés dans le tableau (4-3).

Echantillons	Sans correction de fond continu			Avec correction de fond continu		
	J	C ₂ ⁰⁰	Re(C ₂ ⁰²)	J	C ₂ ⁰⁰	Re(C ₂ ⁰²)
ZR IL	3,7	2,72	-0,25	5,39	3,462	-0,25
ZR VL	4,48	2,31	-0,577	6,5	2,901	-0,6203
ZR.24	5	2,12	-0,587	7,87	2,726	-0,645
ZR.26	4,17	2,15	-0,48	6,40	2,786	-0,528
ZR.236	4,5	2,24	-0,57	6,68	2,801	-0,622

Tableau (4-3) : Valeurs de l'indice de Texture J et des coefficients C₂⁰⁰ et ReC₂⁰² des différents échantillons.

4-5- CALCUL DES COEFFICIENTS DE KEARNS

Les coefficients de KEARNS principaux sont calculés à l'aide des relations suivantes :

$$F_L = \frac{1}{3} - \frac{1}{15} C_2^{00} + \frac{1}{5} \sqrt{\frac{2}{3}} \text{Re} C_2^{02} \quad (4-10)$$

$$F_T = \frac{1}{3} - \frac{1}{15} C_2^{00} - \frac{1}{5} \sqrt{\frac{2}{3}} \text{Re} C_2^{02} \quad (4-11)$$

$$F_N = \frac{1}{3} + \frac{2}{5} C_2^{00}$$

(4-12)

Les coefficients de Kearns principaux des différents échantillons sont fournis dans le tableau (4-4).

La figure (4-18) présente l'orientation des axes \vec{c} suivant les directions DL, DT et DN de l'échantillon ZrIL.

Echantillons	Sans correction de fond continu			Avec correction de fond continu		
	FL	FT	FN	FL	FT	FN
ZRIL	0,111	0,192	0,696	0,061	0,143	0,795
ZRVL	0,085	0,273	0,641	0,038	0,241	0,720
ZR.24	0,096	0,287	0,616	0,046	0,257	0,696
ZR.26	0,111	0,267	0,621	0,061	0,234	0,705
ZR.236	0,090	0,277	0,632	0,045	0,248	0,707

Tableau (4-4) : Coefficients de KEARNS principaux des différents échantillons.

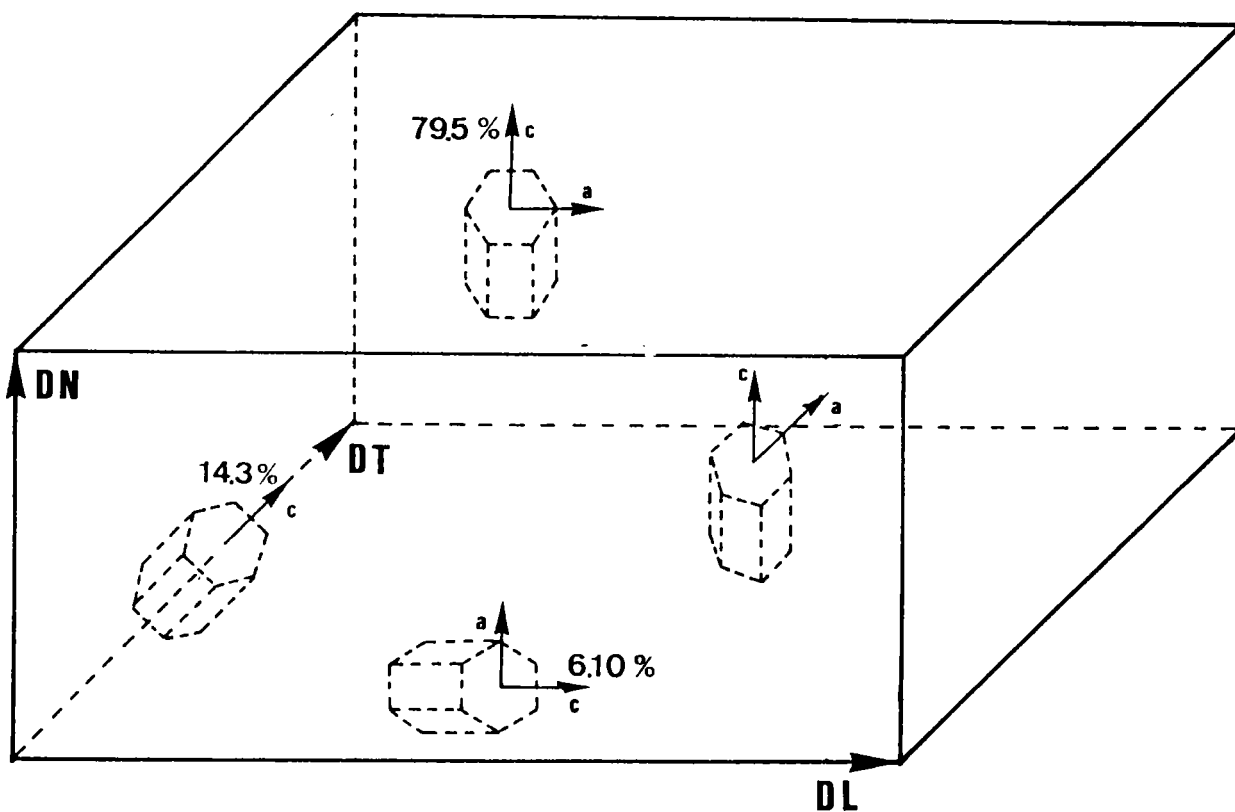


Fig. (4-18) : Orientation des axes \vec{c} selon DL, DT, DN de l'échantillon ZrIL.

4-6- CALCUL DES DEFORMATIONS

4-6-a Calcul des déformations dimensionnelles du monocristal.

1) Cas de variation de volume.

On se propose d'évaluer les déformations du monocristal ϵ_a et ϵ_c en fonction des variations dimensionnelles macroscopiques. On utilise alors les relations (3-116) et (3-117) :

$$\epsilon_a = \frac{F_L E_T - F_T E_L}{F_L - F_T} \quad (4-13)$$

$$\epsilon_c = \frac{(1 - F_T) E_L - (1 - F_L) E_T}{F_L - F_T} \quad (4-14)$$

où E_L (respectivement E_T) est la croissance observée dans la direction de laminage (respectivement dans la direction transverse).

Pour ZrIL les mesures suivantes ont été effectuées par le C.E.A. :

$E_L = 1,61 \times 10^{-4} \phi t^{0,67}$ est la loi de croissance de l'échantillon ZrIL suivant le sens long, (voir tableau (4-5) et fig. (4-19)).

$E_T = 1,24 \times 10^{-4} \phi t^{0,67}$ est la loi de croissance de l'échantillon ZrIL suivant le sens travers, (voir tableau (4-6) et fig. (4-20)).

F_L est le coefficient de Kearns suivant le sens long,

F_T est le coefficient de Kearns suivant le sens travers.

Les résultats des calculs des déformations du monocristal ϵ_a et ϵ_c sont fournis dans le tableau (4-7).

Un nombre plus important de données expérimentales des déformations macroscopiques, suivant d'autres directions de l'échantillon sont nécessaires pour conforter les valeurs du tableau (4-7).

Toutefois ces résultats sont conformes aux observations reportées dans la littérature [31-33]. On constate en effet une diminution de la longueur le long des axes \vec{c} et une augmentation de la longueur des axes \vec{a} .

En remplaçant ϵ_a et ϵ_c par leurs valeurs dans l'expression suivante :

$$\varepsilon(\theta, \gamma) = \varepsilon(\theta) = \varepsilon_a + (\varepsilon_c - \varepsilon_a) \cos^2 \theta \quad (4-15)$$

on obtient la déformation du monocristal suivant une direction cristalline $h(\theta, \gamma)$. Le tableau (4-7) fournit les valeurs calculées dans différentes directions.

La figure (4-21) illustre l'évolution de $\varepsilon(\theta)$ en fonction de θ .

2) Cas de conservation de volume.

On rappelle que la valeur de ε_a , dans le cas de l'hypothèse de conservation de volume, est calculée par une technique de moindres carrés (3-123) :

$$\varepsilon_a = \frac{E_L(1-3F_L) + E_T(1-3F_T)}{(1-3F_L)^2 + (1-3F_T)^2} \quad (4-16)$$

L'estimation de la valeur de ε_a est fournie dans le tableau (4-8).

Sachant que dans ce cas $\varepsilon_c = -2\varepsilon_a$, en remplaçant ε_a et ε_c par leurs valeurs dans l'équation (4-15), la déformation du monocristal suivant une direction cristallographique $h(\theta, \gamma)$ est donnée par :

$$\varepsilon(h) = \varepsilon(\theta) = (1-3 \cos^2 \theta) \varepsilon_a \quad (4-17)$$

La figure (4-22) reproduit les valeurs numériques de $\varepsilon(\theta)$ qui sont données dans le tableau (4-8).

	Sans correction de bruit de fond	Avec correction de bruit de fond
ϵ_a	$2,1 \times 10^{-4} (\phi_t)^{0,67}$	$1,91 \times 10^{-4} (\phi_t)^{0,67}$
ϵ_c	$-2,4 \times 10^{-4} (\phi_t)^{0,67}$	$-2,66 \times 10^{-4} (\phi_t)^{0,67}$
$\epsilon(\theta)$	$(2,1 \times 4,5\cos^2 \theta)10^{-4} (\phi_t)^{0,67}$	$(1,91-4,57\cos^2\theta)10^{-4} (\phi_t)^{0,67}$

Tableau (4-7) : Déformation du monocristal dans le cas de variation de volume

	Sans correction de bruit de fond	Avec correction de bruit de fond
ϵ_a	$2,56 \times 10^{-4} (\phi_t)^{0,67}$	$2,036 \times 10^{-4} (\phi_t)^{0,67}$
ϵ_c	$-5,12 \times 10^{-4} (\phi_t)^{0,67}$	$-4,072 \times 10^{-4} (\phi_t)^{0,67}$
$\epsilon(\theta)$	$(2,56 -7,68\cos^2 \theta)10^{-4} (\phi_t)^{0,67}$	$(2,036-6,108\cos^2 \theta)10^{-4} (\phi_t)^{0,67}$

Tableau (4-8) : Déformation du monocristal dans le cas de conservation de volume

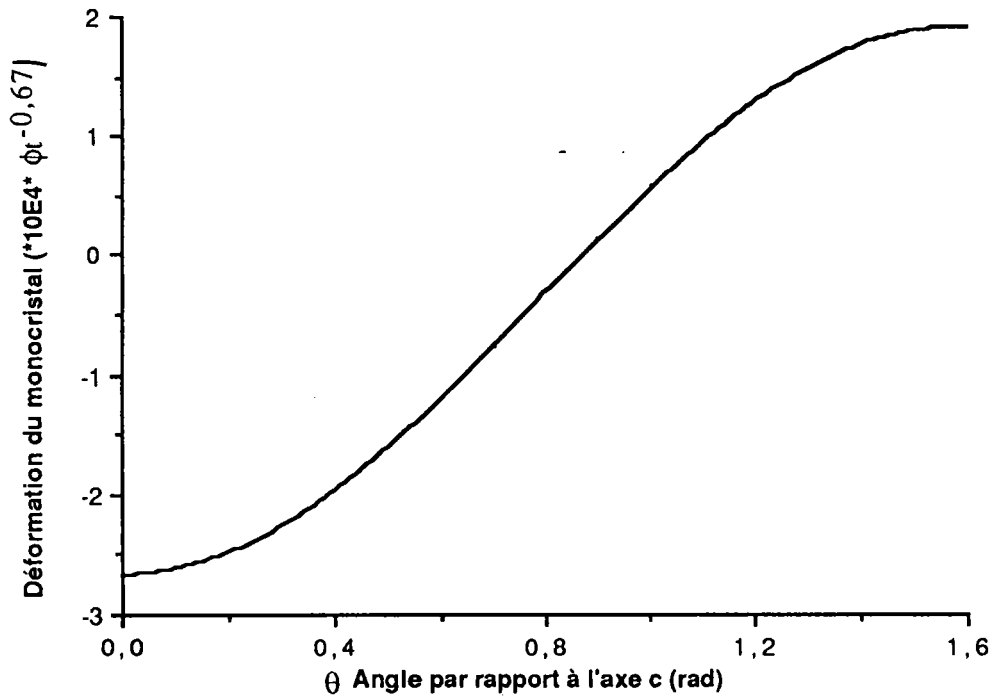


Fig. (4-21) : Variation de la déformation du monocristal $\epsilon(\theta)$ dans le cas de variation de volume.

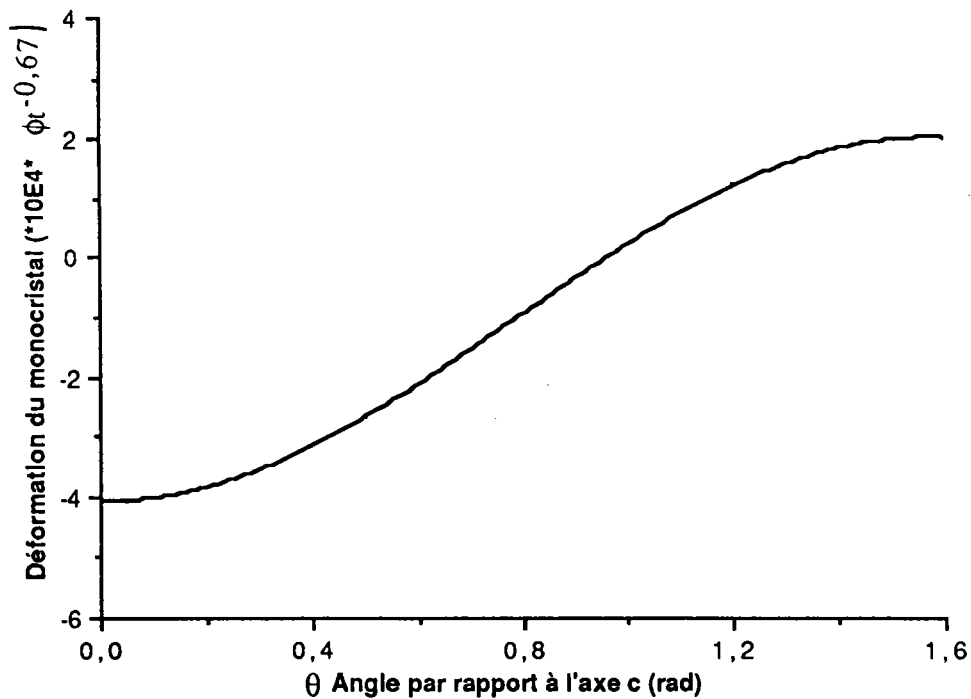


Fig. (4-22) : Variation de la déformation du monocristal $\epsilon(\theta)$ dans le cas de conservation de volume.

-136-

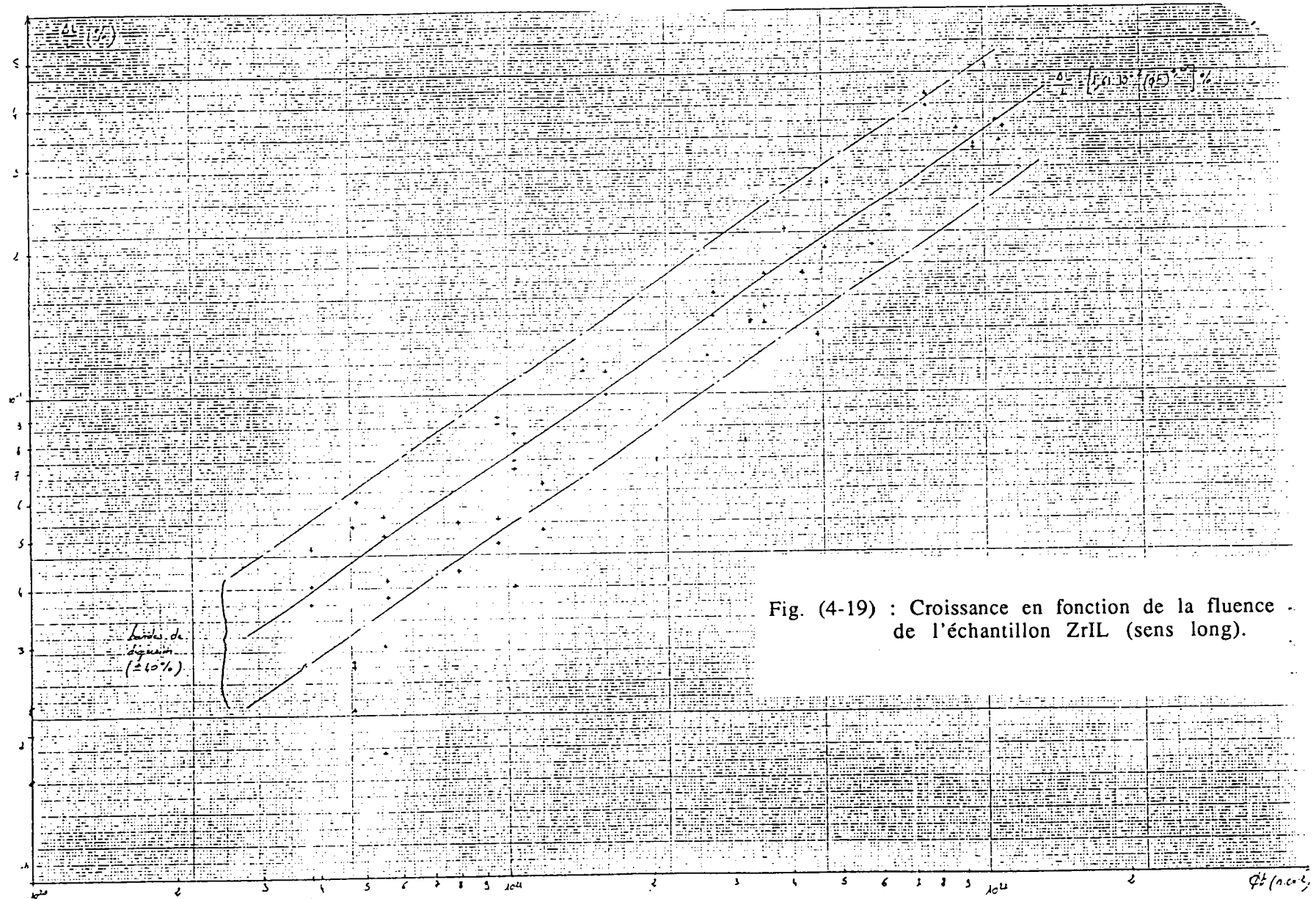


Fig. (4-19) : Croissance en fonction de la fluence de l'échantillon ZrIL (sens long).

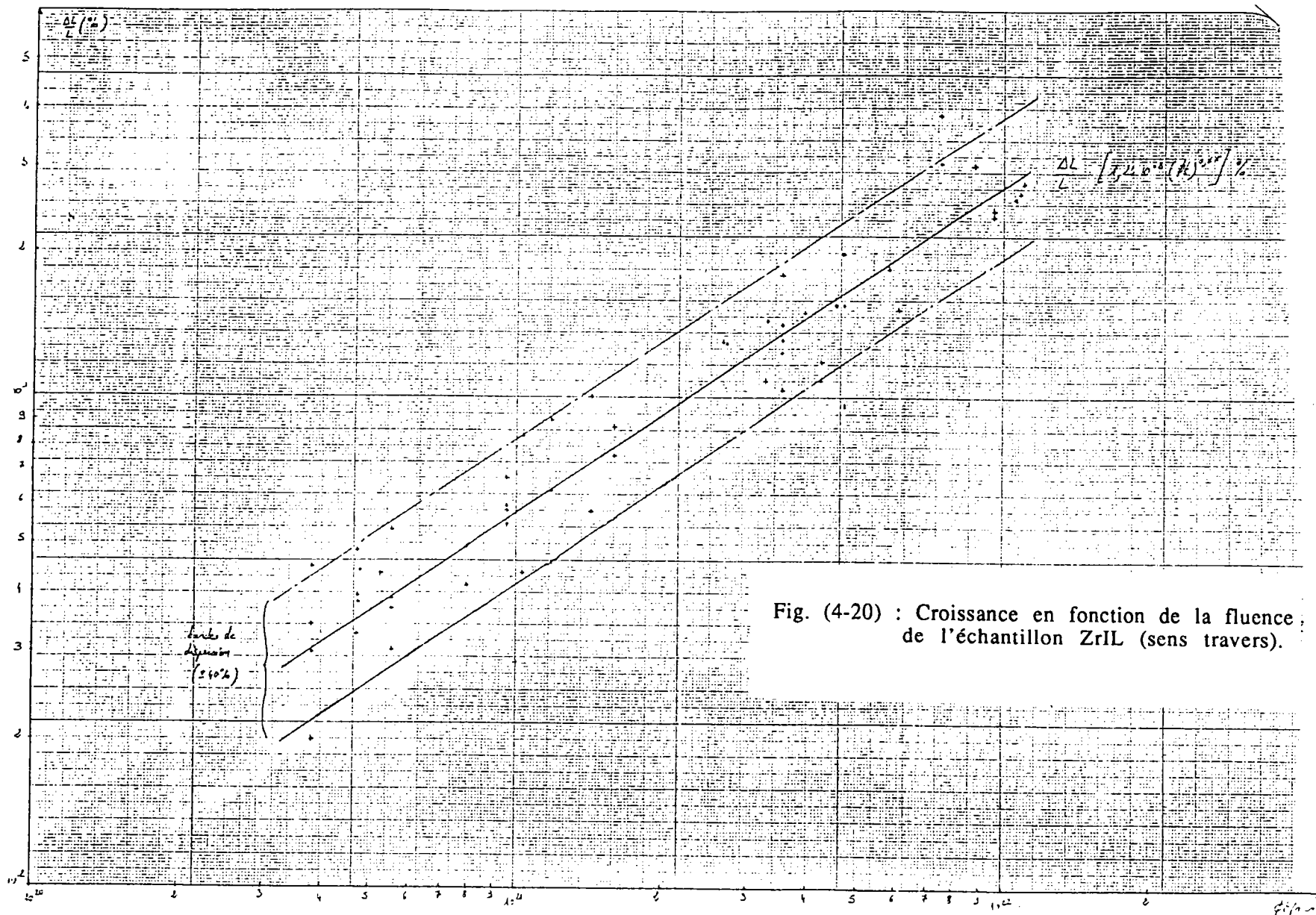


Fig. (4-20) : Croissance en fonction de la fluence de l'échantillon ZrIL (sens travers).

FLUENCE 10E+20N/cm2	CROISSANCE Sans dim.	FLUENCE 10E+20N/cm2	CROISSANCE Sans dim.
3,8	3,69	14,23	11,22
3,8	4,01	14,23	11,83
3,8	4,79	15,85	10
4,71	2,2	15,85	11,13
4,71	2,71	26,5	12,02
4,71	2,78	27,33	14,45
4,71	5,33	27,33	16,09
4,86	6,03	32,86	14,02
5,5	1,79	32,86	14,23
5,5	3	35,21	14,02
5,5	5,17	35,21	15,13
5,5	5,58	35,21	17,65
5,58	3,8	38,9	21,88
5,58	4,11	42,33	17,65
7,88	4,3	45,36	13,18
7,88	5,41	47,13	19,95
9,55	4,9	47,13	32,11
9,55	5,5	58,43	20,26
9,55	8,71	63,09	23,26
9,55	8,98	75,3	39,2
10,31	3,98	75,3	41,69
10,31	7,36	87,1	35,21
10,31	7,24	94,77	32,11
10,31	8,32	94,77	33,11
11,75	5,21	105,5	36,59
11,75	6,51	108	33,11
		110	35,5

Tableau (4-5) : Feuillard Zircaloy-4 Données de croissance sous irradiation Sens Long

FLUENCE 10E+20N/cm2	CROISSANCE Sans dim.	FLUENCE 10E+20N/cm2	CROISSANCE Sans dim.
3,8	2	14,23	5,8
3,8	3	14,23	10
3,8	3,41	15,85	7,59
3,8	4,5	15,85	8,71
4,71	3,26	26,71	13
4,71	3,8	27,12	12,9
4,71	3,92	32,61	10,8
4,71	4,86	32,86	14,3
4,86	4,43	35,21	10,31
5,24	4,36	35,21	12,3
5,53	3,02	35,21	13,08
5,53	3,69	35,21	14,12
5,53	3,86	35,21	17,92
5,53	5,33	39,21	14,91
7,88	4,1	47,13	14,91
7,88	4,93	47,13	19,8
9,55	5,49	58,43	18,48
9,55	5,84	61,19	15,14
9,55	5,98	74,7	30,43
9,55	6,81	74,7	38,31
10,31	4,36	87,1	30,2
10,31	8,32	95,5	23,62
11,75	6,41	95,5	24,36
11,75	8,92	105,5	25,7
		108	26,3
		110	27,75

Tableau (4-6) : Feuillard Zircaloy-4 Données de croissance sous irradiation Sens Travers

4-6-b Variation de la déformation de l'échantillon ZrIL dans les trois plans principaux de la tôle.

A partir de la connaissance des valeurs numériques de ϵ_a et ϵ_c et de la texture de l'échantillon ZrIL, on illustre par les figures (4-23-a), (4-23-b) et (4-23-c) la variation de la déformation macroscopique de l'échantillon ZrIL dans les trois plans principaux et orthogonaux de la tôle.

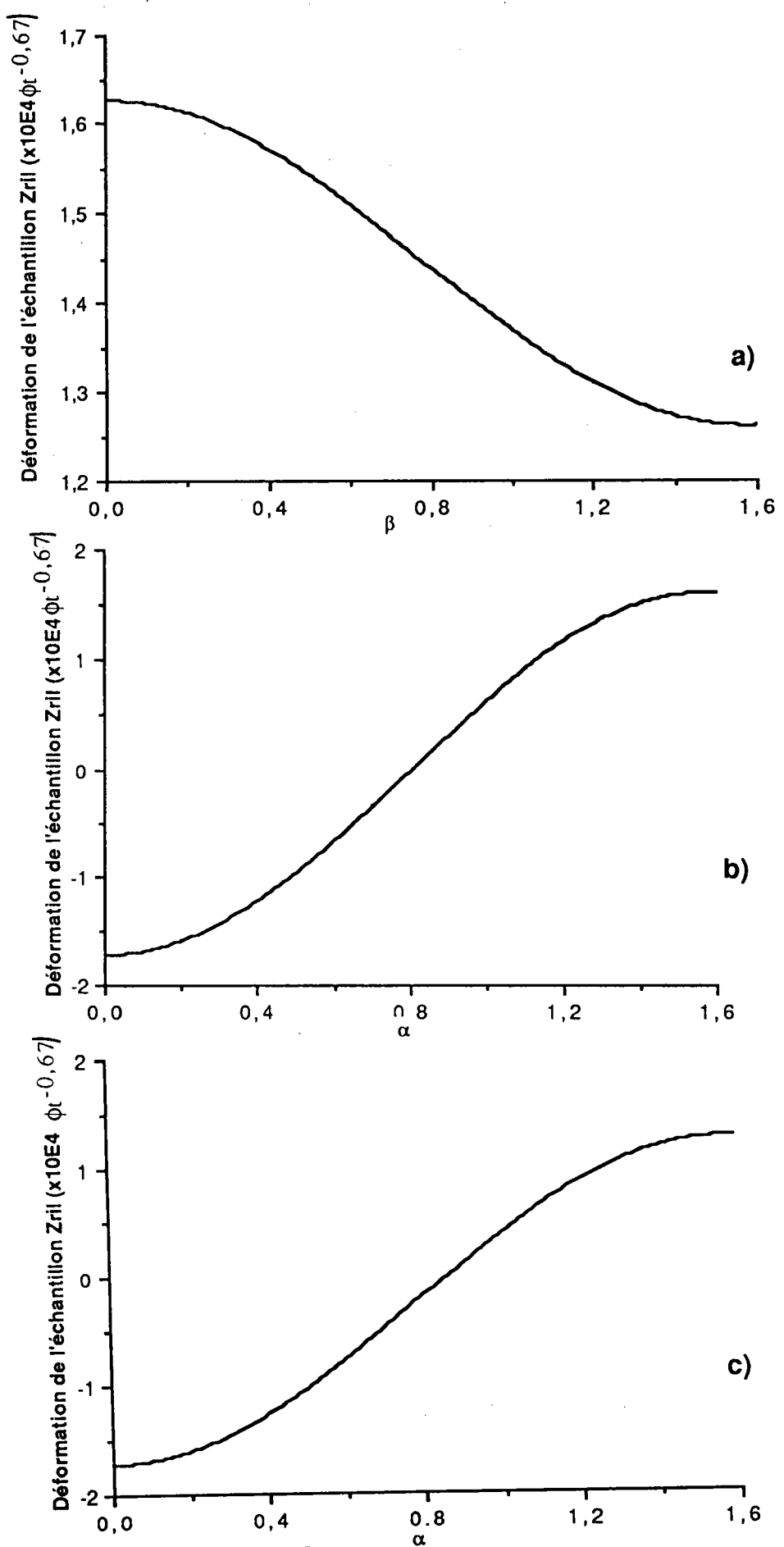


Fig. (4-23) : Variation de la déformation de l'échantillon ZrIL dans les plans formés par les directions

- a) (DL, DT)
- b) (DL, DN)
- c) (DN, DT)

4-6-c Calcul prévisionnel des déformations macroscopiques attribuées aux autres matériaux.

1) Dans le cas de variation de volume.

Comme les autres échantillons ont subi des traitements thermomécaniques et un processus de mise en forme comparables à ceux de l'échantillon ZrIL, on peut alors supposer que les déformations monocristallines sont proches de celles de l'échantillon ZrIL, et par conséquent on estime qu'on peut évaluer les déformations macroscopiques des autres échantillons.

En remplaçant ϵ_a et ϵ_c par leurs valeurs dans la formule de déformation moyenne :

$$\bar{E}(\alpha, \beta) = \epsilon_c f(\alpha, \beta) + (1 - f(\alpha, \beta))\epsilon_a \quad (4-18)$$

Les résultats sont fournis dans le tableau (4-9) où chaque valeur est à multiplier par le terme $10^{-4} \phi t^{0,67}$.

Echantillons	Sans correction de bruit de fond			Avec correction de bruit de fond		
	EDL	EDT	EDN	EDL	EDT	EDN
ZRVL	1,72	0,868	-0,784	1,73	0,806	-1,38
ZR26	1,6	0,9	-0,732	1,63	0,845	-1,201
ZR24	1,67	0,81	-0,694	1,699	0,735	-0,06
ZR236	1,7	0,85	-0,744	1,7	0,776	-1,32

Tableau (4-9) : Déformations principales des divers échantillons dans le cas de variation de volume .

2) Dans le cas de conservation de volume.

La déformation moyenne d'un polycristal, en cas de conservation de volume, est donnée par :

$$\bar{\epsilon}(\alpha, \beta) = (1 - 3 f(\alpha, \beta))\epsilon_a \quad (4-19)$$

En remplaçant ϵ_a par sa valeur dans cette dernière formule, on obtient les déformations macroscopiques des divers échantillons voir tableau (4-10), où chaque valeur est à multiplier par le terme $10^{-4} \phi^{0,67}$.

Echantillons	Sans correction de bruit de fond			Avec correction de bruit de fond		
	EDL	EDT	EDN	EDL	EDT	EDN
ZRVL	1,907	0,463	-2,362	1,804	0,564	-2,361
ZR26	1,823	0,356	-2,17	1,755	0,466	-2,215
ZR24	1,707	0,683	-2,209	1,663	0,607	-2,270
ZR236	1,77	0,432	-2,294	1,761	0,512	-2,282

Tableau (4-10) : Déformations principales des divers échantillons dans le cas de conservation de volume.

4-6-d- Commentaires sur les résultats.

Ainsi qu'il a été signalé au paragraphe 4-2-c, la prise en compte ou non du fond continu modifie de façon sensible les valeurs numériques des coefficients de texture et des valeurs de dilatation du monocristal calculées à partir de l'échantillon polycristallin. Toutefois, grâce à "l'auto-cohérence" du modèle développé, les résultats définitifs en termes de dilatation linéaire du polycristal sont d'une bonne stabilité par rapport au

problème de la correction optimale du bruit de fond.

Les résultats des tableaux (4-7) et (4-8) sont conformes aux observations reportées dans la littérature. On constate une diminution de la longueur des axes \vec{c} et une augmentation de la longueur des axes \vec{a} .

4-7-COEFFICIENT DE CROISSANCE

Dans le cas de conservation de volume, le coefficient de croissance a été défini par [24,25] de la manière suivante :

$$G(\alpha, \beta) = \frac{\bar{E}(\alpha, \beta)}{\epsilon a} = 1 - 3 f(\alpha, \beta) = -\frac{C_2^{00}}{5} (3 \cos^2 \alpha - 1) - \frac{\sqrt{6}}{5} \cos 2\beta (1 - \cos^2 \alpha) \operatorname{Re} C_2^{02} \quad (4-20)$$

Dans le tableau (4-12) on a représenté les valeurs des coefficients de croissance principaux.

On remarquera que la somme des trois coefficients de croissance principaux de la tôle est nulle.

$$G(0,0) + G(0,90) + G(90,0) = 0 \quad (4-21)$$

Les figures (4-24-a), (4-24-b) et (4-24-c) représentent la variation du coefficient de croissance dans les trois plans principaux et orthogonaux de la tôle ZrIL.

Echantillons	Sans correction de bruit de fond			Avec correction de bruit de fond		
	GDL	GDT	GDN	GDL	GDT	GDN
ZRVL	0,745	0,181	-0,923	0,886	0,277	-1,16
ZR26	0,712	0,139	-0,848	0,862	0,229	-1,088
ZR24	0,667	0,267	-0,863	0,817	0,298	-1,115
ZR236	0,73	0,169	-0,896	0,865	0,256	-1,121

Tableau (4-11) : Coefficients de croissance principaux de différents échantillons.

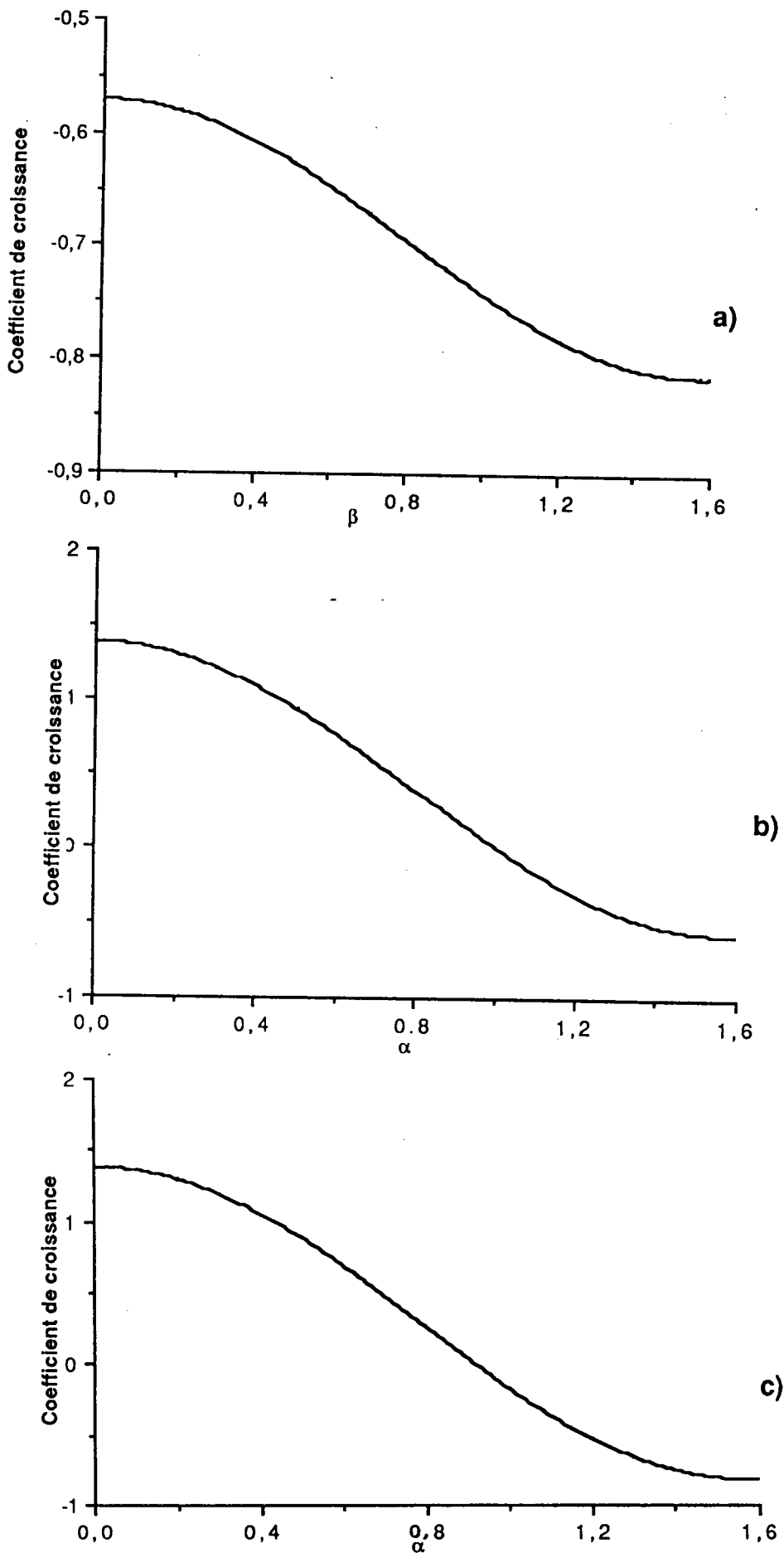


Fig. (4-24) : Variation du coefficient de croissance de ZrIL dans les plans formés par les directions :

- a) (DL, DT)
- b) (DL, DN)
- c) (DN, DT)

4-8 CALCUL DES EXTREMA DE LA DEFORMATION MACROSCOPIQUE DE LA TOLE

On recherche les extrema en annulant simultanément les dérivées partielles de la déformation par rapport aux angles α et β .

$$\frac{\partial E(\alpha, \beta)}{\partial \alpha} = \frac{\sin 2 \alpha}{5} (\epsilon_a - \epsilon_c) \left[C_2^{00} + \sqrt{\frac{2}{3}} \text{Re} C_2^{02} \cos^2 \beta \right] = 0 \quad (4-22)$$

$$\epsilon_a - \epsilon_c \neq 0$$

$$\sin 2 \alpha = 0 \Rightarrow \begin{cases} \alpha = 0 \\ \alpha = \frac{\pi}{2} \end{cases} \quad (4-23)$$

prenant C_2^{00} et $\text{Re} C_2^{02}$ de ZrIL :

$$\cos 2 \beta = - \frac{C_2^{00}}{\sqrt{\frac{2}{3}} \text{Re} C_2^{02}} = 13,325 \quad (4-24)$$

ce qui est impossible, c'est à dire que le second terme ne peut être nul.

$$\frac{\partial E(\alpha, \beta)}{\partial \beta} = \frac{2}{5} \sqrt{\frac{2}{3}} \text{Re} C_2^{02} (\cos^2 \alpha - 1) \sin 2 \beta (\epsilon_c - \epsilon_a) = 0 \quad (4-25)$$

$$\cos^2 \alpha - 1 = 0 \Rightarrow \cos^2 \alpha = 1 \text{ avec } 0 \leq \alpha \leq \frac{\pi}{2} \Rightarrow \alpha = 0 \quad (4-26)$$

$$\sin 2 \beta = 0 \text{ soit } \begin{cases} \beta = 0 \\ \beta = \frac{\pi}{2} \end{cases} \text{ ou} \quad (4-27)$$

finalement on a :

pour $\alpha = 0$ et $\beta = 0$ c'est la direction normale, l'extrémum ici est un minimum c'est à dire la plus grande contraction ou compression. Ce qui est confirmé par les figures (4-23-a), (4-23-b) et (4-23-c).

pour $\alpha = \frac{\pi}{2}$ et $\beta = 0$ direction de laminage : DL.

$\alpha = \frac{\pi}{2}$ et $\beta = \frac{\pi}{2}$ direction transverse : DT.

on voit bien que l'extremum dans ce cas est un maximum, c'est à dire une expansion.

Ainsi la figure (4-18) montre que : le plus grand nombre des axes \vec{c} est suivant DN où l'on a la plus grande contraction et le plus grand nombre des axes \vec{a} est suivant DL où l'on a la plus grande expansion.

Ces résultats sont comparables aux résultats proposés par P. MORIZE [26], J. KEARNS [27] et ainsi que d'autres auteurs [28,29,30] : ils ont trouvé que les extréma de la déformation causée par l'irradiation sur une tôle de Zircaloy laminée sont portés par les directions principales de la tôle.

4-9 VARIATION DES DEFORMATIONS VOLUMIQUES EN FONCTION DE LA FLUENCE.

La déformation volumique du cristallite ou du polycristal (tôle) est donnée par :

$$\frac{\Delta v}{v_0} = \bar{E}_L + \bar{E}_T + \bar{E}_N = \epsilon_c + 2 \epsilon_a \quad (4-28)$$

En remplaçant chaque élément par sa valeur on obtient $\frac{\Delta v}{v_0}$ égal à :

$$\frac{\Delta v}{v_0} = 1,16 \times 10^{-4} \phi t^{0,67} \quad (4-29)$$

La figure (4-25) donne la variation de $\frac{\Delta v}{v_0}$ en fonction de la fluence.

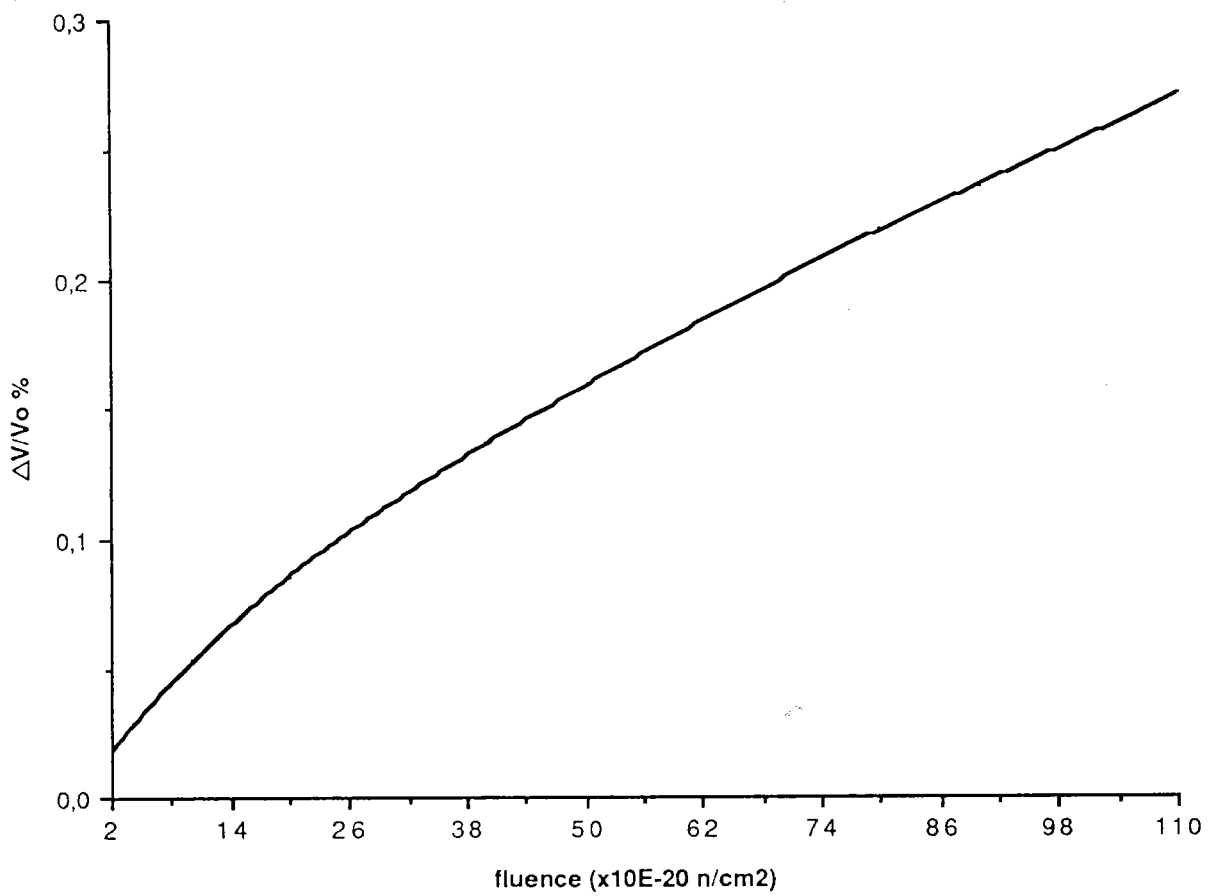


Fig. (4-25) : Variation volumique moyenne de ZrIL

4-10- CONCLUSION

a) En toute généralité les prédictions des déformations du polycristal sont sensibles à la correction de fond continu. Toutefois, la manière dont on utilise le modèle permet d'atténuer cette influence. En effet, les caractéristiques du polycristal et du monocristal sont obtenues à partir du même mode opératoire de détermination des textures.

b) Les valeurs numériques des coefficients de KEARNS montrent que le plus grand nombre des axes \vec{c} (traduit par le terme f_N) est orienté selon la direction normale qui présente la plus grande contraction, et le plus grand nombre des axes \vec{a} est orienté selon la direction de laminage où l'on a la plus grande expansion.

c) La croissance de l'échantillon ZrIL, dans le cas le plus défavorable c'est à dire pour la fluence maximale $110 \cdot 10^{20} \text{ n/cm}^2$, est accompagnée d'une légère augmentation de volume de l'ordre de 0,27 %.

REFERENCES DU QUATRIEME CHAPITRE

- [1] H.J.BUNGE "Texture analysis in materials science" Mathematical methods. Butterworth (1982).
- [2] H.H. BUNGE and C. ESLING "Quantitative Texture analysis" D.G.M. (1982).
- [3] P. COULOMB "Les textures dans les métaux de réseau cubique" Dunod. Paris (1972).
- [4] P. DERVIN "Thèse de docteur-ingénieur" présentée à l'Université de Paris-Sud. (Juin 1978).
- [5] L.G. SCHULZ "J. Appl. phys." 20 (1949) 1030.
- [6] J.C. COUTERNE et G. CIZERON "J. Appl.cryst" 4 p.461 (1971)
- [7] C. FENG "J. Appl.phys." 36 p.3432 (1965).
- [8] W.P. CHERNOCK et P.A. BECK "J. Appl.phys." 23 p.341 (1952)
- [9] TENCKHOFF "J. Appl.phys" 41- p.3944 (1970)
- [10] D. RUER "Thèse de docteur ingénieur" présentée à l'Université de Metz -(novembre 1971).
- [11] K.VON GEHLEN "Beiträge Zur mineralogie und petrographie" 7 p 340 (1960)
- [12] M. PIRVULETU "Diplomarbeit" Aix la Chapelle (1972)
- [13] G; WASSERMANN und J. GREWEN "Texturen metallischer Werkstoffe" Springer-Verlag Berlin (1962)
- [14] J.C. COUTERNE et G. CIZERON "3ème Colloque Européen sur les Textures" Pont à Mousson (1973)
- [15] M. HUMBERT "Thèse de 3ème cycle" à l'Université de Nancy, (mai 1976).

- [16] F. WAGNER and M. HUMBERT "Texture Analysis from incomplete pole figures in low symmetry cases" *Texture and microstructure*, vol.7, (1987) p. 115-129.
- [17] C.S. BARRET et J.B. MASSALSKI, *structure of metals*, Mc Graw-Hill (1966)
- [18] M. PERNOT, Thèse d'Etat, Orsay (1977)
- [19] J.P. MARDON, Thèse 3ème cycle, ORSAY (1977)
- [20] L.G. SCHULZ, "J. Appl.phys. 20 (1949) 1033.
- [21] B.F. BECKER, E.T. Asp and D. HERKER, *J. Appl.phys.* 19 (1948) 388
- [22] E.F. STURKEN, U.S. AEC. Rep. NLCO 9, p. 804, (1960).
- [23] E.F. STURKEN and J.W. CROACH "Predicting physical properties in oriented metal" *Trans.met.soc. AIME*, 227, 934-940, (1963).
- [24] R.V. HESKETH, J.E. HARBOTTLE, N.A. WATERMAN and R.C. LOBB in "Radiation damage in reactor materials" IAEA, Vienna, (1969) p.365.
- [25] E.F. IBRAHIM and J.E. WINEGAR -*J.Nucl.Mater.* 45 (1972) 335.
- [26] P. MORIZE "Anisotropie de texture dans le zircaloy-croissance sous irradiation" CACEMI- Metz-13-15 décembre 1983.
- [27] J.J. KEARNS - WAPD - TM- 472 (1965)
- [28] R.B. ADAMSON "Irradiation growth of Zircaloy" Symposium on zirconium in nuclear industry" Quebec 1976 ASTM 633 p.326.
- [29] R.B. ADAMSON, R.P. TUCKER et V. FIDLERIS "High Temperature irradiation growth in Zircaloy" Symposium in nuclear industry Boston(1980) ASTM - STP 754 p.208.
- [30] CHALK. RIVER "Fundamental mechanisms of radiation induced creep and growth" *Proceedings of the international conference* (mai 1979) Reprinted from *JMN* 90.1980.

CHAPITRE V
ESTIMATION DES ERREURS

5-1- INTRODUCTION

5-2- ESTIMATION DES ERREURS SUR LES COEFFICIENTS DE TEXTURE

$$C_2^{00} \text{ et } C_2^{02}$$

5-3- ESTIMATION DES ERREURS SUR LES COEFFICIENTS DE KEARNS.

5-4- ESTIMATION DES ERREURS SUR LES DEFORMATIONS MACROSCOPIQUES MOYENNES.

5-5- DISCUSSION SUR LES HYPOTHESES DE LA CONSERVATION DE VOLUME.

5-6- ESTIMATION DES ERREURS SUR LES DEFORMATIONS MICROSCOPIQUES MOYENNES.

A) en cas de variation de volume

B) en cas de conservation de volume.

5-7- DETERMINATION DU COMPORTEMENT DU MONOCRISTAL ET DE SA PRECISION DANS LE CAS DES VALEURS MAXIMALES DE E_L et E_T .

5-8- CONCLUSION.

ESTIMATION DES ERREURS

5-1 INTRODUCTION

Ce chapitre est consacré à l'étude de la précision des différentes évaluations.

Dans un premier temps on calcule les erreurs absolues et relatives des paramètres suivants :

- des coefficients de texture C_2^{00} et C_2^{02} ,
- des coefficients de Kearns principaux,
- des déformations macroscopiques E_L et E_T ,
- des déformations microscopiques ϵ_a et ϵ_c .

Dans une première étape, l'estimation des erreurs sur les déformations microscopiques est effectuée à partir des valeurs moyennes de E_L et E_T et des erreurs de mesure dimensionnelle correspondante.

Compte tenu de la dispersion des points (voir figure (4-19) et (4-20)), la texture n'est sans doute pas le seul paramètre impliqué dans la croissance, même si le poids de la texture est important.

Dans une seconde étape, il est nécessaire de raisonner par rapport aux valeurs maximales (de E_L et de E_T) dans le but d'encadrer avec sécurité les marges d'erreur. Le but de ces calculs est la détermination de la précision de la méthode de détermination indirecte des déformations microscopiques ϵ_a et ϵ_c (par exploitation du modèle établi) rendant compte de la croissance à fluence fixée.

5-2- ESTIMATION DES ERREURS SUR LES COEFFICIENTS DE TEXTURE C_2^{00} et C_2^{02}

1.2.31.

La précision avec laquelle on obtient la fonction de texture dépend notamment de la qualité des mesures expérimentales et de leur correction. Un soin particulier doit être apporté à la mesure du fond continu. Dans ces conditions et dans le meilleur des cas on estime que la précision des

coefficients de texture C_1^{mn} est de l'ordre de 5% :

$$\left| \frac{\Delta C_1^{mn}}{C_1^{mn}} \right| = 0,05 \quad (5-1)$$

L'ensemble des résultats est présenté dans le tableau (5-1).

5-3- ESTIMATION DES ERREURS SUR LES COEFFICIENTS DE KEARNS.

L'expression de coefficient d'anisotropie en fonction des coefficients C_1^{mn}

$$\begin{aligned} F_L &= \frac{1}{3} - \frac{1}{15} C_2^{00} + \frac{1}{5} \sqrt{\frac{2}{3}} \operatorname{Re} C_2^{02} \\ F_T &= \frac{1}{3} - \frac{1}{15} C_2^{00} - \frac{1}{5} \sqrt{\frac{2}{3}} \operatorname{Re} C_2^{02} \\ F_N &= \frac{1}{3} + \frac{2}{15} C_2^{00} \end{aligned} \quad (5-2)$$

permet d'estimer les erreurs absolues sur ces coefficients.

$$\begin{aligned} \Delta F_L &= \frac{1}{15} \Delta C_2^{00} + \frac{1}{5} \sqrt{\frac{2}{3}} \Delta C_2^{02} \\ \Delta F_T &= \frac{1}{15} \Delta C_2^{00} - \frac{1}{5} \sqrt{\frac{2}{3}} \Delta C_2^{02} \\ \Delta F_N &= \frac{2}{15} \Delta C_2^{00} \end{aligned} \quad (5-3)$$

On remarque que ΔF_L et ΔF_T sont égaux et que ΔF_N est plus grand dans le cas particulier étudié que ΔF_L et ΔF_T (tabl. (5-1)).

Par suite on peut déduire les erreurs relatives.

$$\begin{aligned}
\left| \frac{\Delta F_L}{F_L} \right| &= \frac{1}{|F_L|} \left| \frac{1}{15} \Delta C_2^{00} + \frac{1}{5} \sqrt{\frac{2}{3}} \Delta C_2^{02} \right| \\
\left| \frac{\Delta F_T}{F_T} \right| &= \frac{1}{|F_T|} \left| \frac{1}{15} \Delta C_2^{00} + \frac{1}{5} \sqrt{\frac{2}{3}} \Delta C_2^{02} \right| \\
\left| \frac{\Delta F_N}{F_N} \right| &= \frac{1}{|F_N|} \left| \frac{\Delta C_2^{00}}{F_N} \right|
\end{aligned}
\tag{5-4}$$

Comme F_L est inférieur à F_T et F_N , on remarque que $\frac{\Delta F_L}{F_L}$ est supérieur à $\frac{\Delta F_T}{F_T}$

et $\frac{\Delta F_N}{F_N}$

(voir tableau (5-1)).

5-4 ESTIMATION DES ERREURS SUR LES DEFORMATIONS MACROSCOPIQUES MOYENNES

L'expression de la déformation macroscopique E_L de l'échantillon ZrIL suivant le sens long

$$E_L = \frac{L - L_0}{L_0} \tag{5-5}$$

permet d'estimer l'erreur absolue sur E_L .

L_0 : longueur de l'échantillon ZrIL suivant le sens long, avant irradiation.

L : la valeur de L_0 après irradiation.

$$dE_L = d \left(\frac{L - L_0}{L_0} \right) = d \left(\frac{L}{L_0} - 1 \right) = \frac{dL}{L_0} - \frac{dL_0 \times L}{L_0^2} \tag{5-6}$$

C_2^{00}	3,462
$Re C_2^{02}$	- 0,25
FL	0,061
FT	0,143
FN	0,795
ΔC_2^{00}	0,1731
ΔC_2^{02}	0,0125
ΔFL	0,01358
ΔFT	0,01358
ΔFN	0,02308
$\frac{\Delta C_2^{00}}{C_2^{00}}$	5 %
$\left \frac{\Delta Re C_2^{02}}{Re C_2^{02}} \right $	5 %
$\Delta FL/FL$	22,26 %
$\Delta FT/FT$	9,5 %
$\Delta FN/FN$	2,9 %

Tableau (5-1) : Estimation des erreurs sur les coefficients C_1^{mn} et F_i

$$\Delta E_L = \frac{\Delta L}{L_0} + \frac{L \Delta L_0}{L_0^2} \quad (5-7)$$

ΔL_0 est l'erreur absolue effectuée sur la mesure de L_0 .

ΔL est l'erreur absolue effectuée sur la mesure de L .

Les mesures effectuées sur l'échantillon ZrIL irradié sont réalisées suivant la même procédure avant et après irradiation.

$$\Delta L = \Delta L_0 \quad (5-8)$$

De ce fait, L s'exprime en fonction de L_0

$$L = E_L L_0 + L_0 \quad (5-9)$$

En remplaçant les équations (5-8) et (5-9) dans l'éq (5-7), on aura alors :

$$\Delta E_L = \frac{\Delta L_0}{L_0} (2 + E_L) \quad (5-10)$$

Un calcul similaire pour ΔE_T donne :

$$\Delta E_T = \frac{\Delta T_0}{T_0} (2 + E_T) \quad (5-11)$$

On remarque que ΔE_L et ΔE_T sont proportionnelles à $\frac{\Delta L_0}{L_0}$ et $\frac{\Delta T_0}{T_0}$

respectivement et compte tenu de la loi de croissance de ZrIL à $\phi t^{0,67}$ (ϕt : fluence).

On a donc intérêt à avoir $\frac{\Delta L_0}{L_0}$ et $\frac{\Delta T_0}{T_0}$ les plus faibles possible afin d'avoir

ΔE_L et ΔE_T les plus faibles possibles.

Par suite on peut déduire les erreurs relatives.

$$\frac{\Delta E_L}{E_L} = \frac{\Delta L_0}{L_0} (1 + 2 E_L^{-1}) \quad (5-12)$$

$$\frac{\Delta E_T}{E_T} = \frac{\Delta T_0}{T_0} (1 + 2 E_T^{-1}) \quad (5-13)$$

Les courbes de variations de $\frac{\Delta E_L}{E_L}$ et $\frac{\Delta E_T}{E_T}$ ont des allures d'hyperbole qui décroissent quand la fluence augmente (voir tableau (5-2) et figure (5-1)).

Si l'on prend l'intervalle de fluence suivant : $[3,8 \times 10^{20} \text{ n/cm}^2 ,$

$110 \times 10^{20} \text{ n/cm}^2]$ dans le cas le plus défavorable E_L et E_T sont déterminés avec les précisions d'ordre suivant ($\phi t = 3,8. 10^{20} \text{ n/cm}^2$) :

$$\frac{\Delta E_L}{E_L} = 24,08 \% \quad (5-14)$$

$$\frac{\Delta E_T}{E_T} = 31,28 \% \quad (5-15)$$

5-5- DISCUSSION SUR LES HYPOTHESES DE LA CONSERVATION DE VOLUME.

On rappelle que la valeur de ϵ_a calculée par la technique des moindres carrés [4] , est égale à :

$$\epsilon_a = \frac{E_L(1-3F_L) + E_T(1-3F_T)}{(1-3F_L)^2 + (1-3F_T)^2} \quad (5-16)$$

Dans le cas de conservation de volume ($\epsilon_c + 2 \epsilon_a = 0$), la valeur de ϵ_a réintroduite dans le système

$$\begin{aligned}
 E_L &= (1-3F_L) \varepsilon_a \\
 E_T &= (1-3F_T) \varepsilon_a
 \end{aligned}
 \tag{5-17}$$

permet d'évaluer l'écart entre les valeurs mesurées et les valeurs calculées

$$\begin{aligned}
 \delta E_L &= \frac{E_L(1-3F_T)^2 - E_T(1-3F_T)(1-3F_L)}{(1-3F_L)^2 + (1-3F_T)^2} \\
 \delta E_T &= \frac{E_T(1-3F_L) - E_L(1-3F_T)(1-3F_L)}{(1-3F_L)^2 + (1-3F_T)^2}
 \end{aligned}
 \tag{5-18}$$

On remarque que les valeurs de δE_L et δE_T sont faibles vis à vis des erreurs expérimentales de détermination de E_L et E_T ; en effet, on constate

que $\frac{\delta E_L}{E_L} = 3,34 \%$ et $\frac{\delta E_T}{E_T} = 6,21 \%$ sont de bonnes précisions.

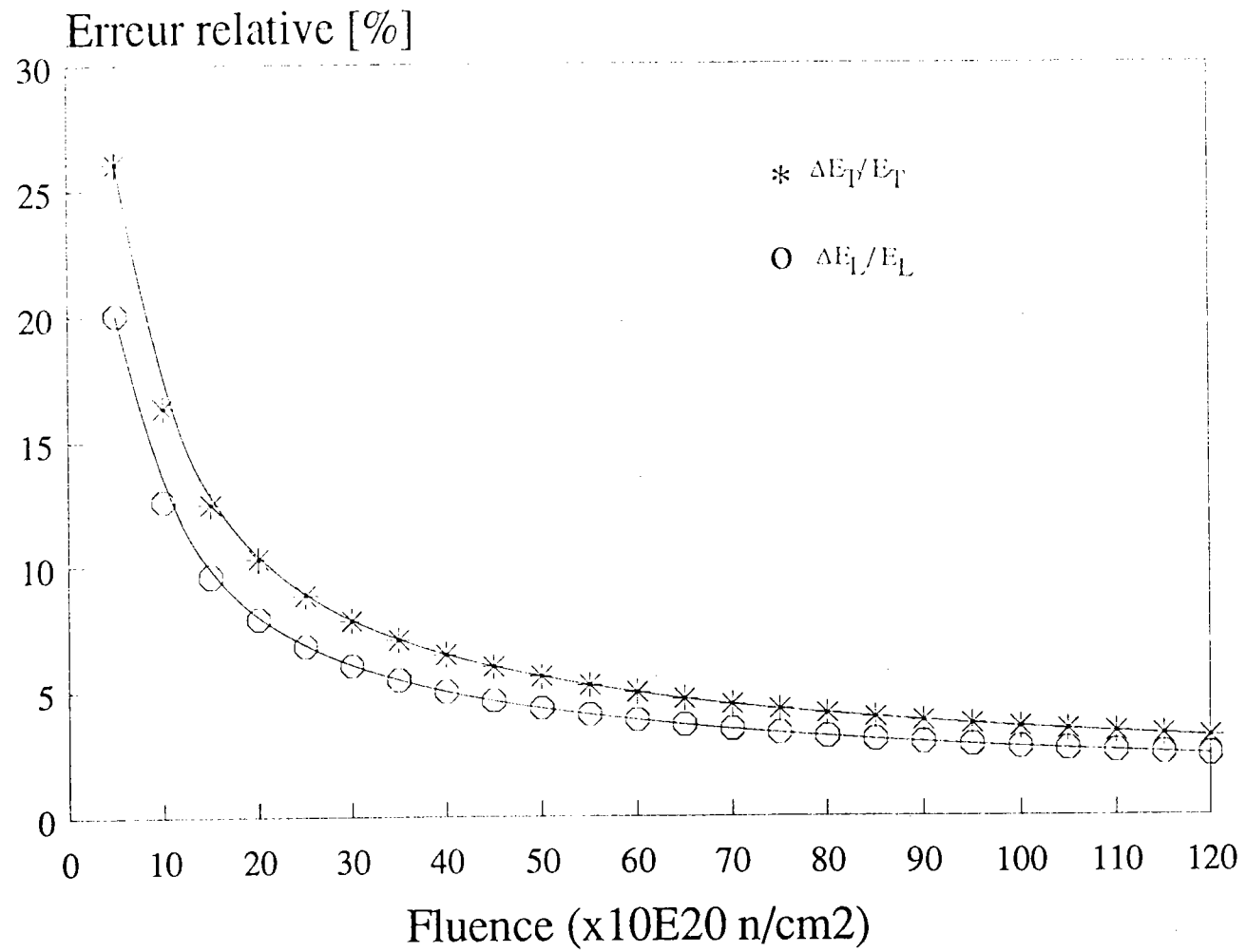
Ces valeurs permettent de conclure que l'hypothèse de conservation de volume reste plausible.

Certains auteurs [5-7] indiquent cependant que pour la température et la fluence indiquées on observe une légère augmentation de volume attribuée probablement à une montée de dislocations.

L ₀	42,1662 mm
T ₀	42,1668 mm
E _L	$1,61 \times 10^{-4} \times (\phi_t)^{0,67}$
E _T	$1,24 \times 10^{-4} \times (\phi_t)^{0,67}$
ΔL_0	2×10^{-3} mm
ΔT_0	2×10^{-3} mm
ΔE_L	$7,636 \times 10^{-9} \times (\phi_t)^{0,67} + 9,486 \times 10^{-5}$
δE_L	$0,05389 \times 10^{-4} \times (\phi_t)^{0,67}$
ΔE_T	$5,88 \times 10^{-9} \times (\phi_t)^{0,67} + 9,486 \times 10^{-5}$
δE_T	$0,0771089 \times 10^{-4} \times (\phi_t)^{0,67}$
$\Delta L_0/L_0$	$[4,743 \times 10^{-3}] \%$
$\Delta T_0/T_0$	$[4,743 \times 10^{-3}] \%$
$\Delta E_L/E_L$	$[4,743 \times 10^{-3} + 58,9(\phi_t)^{-0,67}] \%$
$\Delta E_T/E_T$	$[4,743 \times 10^{-3} + 76,5(\phi_t)^{-0,67}] \%$
$\delta E_L/E_L$	3,34 %
$\delta E_T/E_T$	6,21 %

Tableau (5-2) : Estimation des erreurs sur les déformations macroscopiques moyennes.

Figure (5-1) : Variation de $\Delta E_T/E_L$ et $\Delta E_T/E_T$ en fonction de la fluence



5-6- ESTIMATION DES ERREURS SUR LES DEFORMATIONS MICROSCOPIQUES
MOYENNES :

A) En cas de variation de volume.

Les déformations microscopiques ϵ_a et ϵ_c sont données par :

$$\begin{aligned}\epsilon_a &= \frac{F_L E_T - F_T E_L}{F_L - F_T} \\ \epsilon_c &= \frac{(1 - F_T) E_L - (1 - F_L) E_T}{F_L - F_T}\end{aligned}\quad (5-19)$$

Les grandeurs F_L et F_T étant des valeurs intermédiaires, on exprime alors ϵ_a et ϵ_c directement en fonction de C_2^{00} et C_2^{02} .

Le système (5-19) devient :

$$\begin{aligned}\epsilon_a &= \frac{(E_T - E_L) \left(\frac{1}{3} - \frac{1}{15} C_2^{00} \right)}{\frac{2}{5} \sqrt{\frac{2}{3}} C_2^{02}} + \frac{1}{2} (E_L + E_T) \\ \epsilon_c &= \frac{(E_L - E_T) \left(\frac{2}{3} + \frac{1}{15} C_2^{00} \right)}{\frac{2}{5} \sqrt{\frac{2}{3}} C_2^{02}} + \frac{1}{2} (E_L + E_T)\end{aligned}\quad (5-20)$$

Estimation des erreurs absolues sur ϵ_a et ϵ_c :

$$\Delta \epsilon_a = \left| \frac{\partial \epsilon_a}{\partial C_2^{00}} \right| \Delta C_2^{00} + \left| \frac{\partial \epsilon_a}{\partial C_2^{02}} \right| \Delta C_2^{02} + \left| \frac{\partial \epsilon_a}{\partial E_L} \right| \Delta E_L + \left| \frac{\partial \epsilon_a}{\partial E_T} \right| \Delta E_T$$

(5-21)

$$\Delta \varepsilon_a = \left| \frac{(E_L - E_T)}{2\sqrt{6}C_2^{02}} \right| \Delta C_2^{00} + \left| \frac{(E_L - E_T) \left(\frac{1}{3} - \frac{1}{15} C_2^{00} \right)}{\frac{2}{5} \sqrt{\frac{2}{3}} (C_2^{02})^2} \right| \Delta C_2^{02} + \left| \frac{- \left(\frac{1}{3} - \frac{1}{15} C_2^{00} - \frac{1}{5} \sqrt{\frac{2}{3}} C_2^{02} \right)}{\frac{2}{5} \sqrt{\frac{2}{3}} C_2^{02}} \right| \Delta E_L$$

$$+ \left| \frac{\left(\frac{1}{3} - \frac{1}{15} C_2^{00} + \frac{1}{5} \sqrt{\frac{2}{3}} C_2^{02} \right)}{\frac{2}{5} \sqrt{\frac{2}{3}} C_2^{02}} \right| \Delta E_T \quad (5-22)$$

$$\Delta \varepsilon_c = \left| \frac{\partial \varepsilon_c}{\partial C_2^{00}} \right| \Delta C_2^{00} + \left| \frac{\partial \varepsilon_c}{\partial C_2^{02}} \right| \Delta C_2^{02} + \left| \frac{\partial \varepsilon_c}{\partial E_L} \right| \Delta E_L + \left| \frac{\partial \varepsilon_c}{\partial E_T} \right| \Delta E_T \quad (5-23)$$

$$\Delta \varepsilon_c = \left| \frac{(E_L - E_T)}{2\sqrt{6}C_2^{02}} \right| \Delta C_2^{00} + \left| \frac{(E_T - E_L) \left(\frac{2}{3} + \frac{1}{15} C_2^{00} \right)}{\frac{2}{5} \sqrt{\frac{2}{3}} (C_2^{02})^2} \right| \Delta C_2^{02} + \left| \frac{\left(\frac{2}{3} + \frac{1}{15} C_2^{00} + \frac{1}{5} \sqrt{\frac{2}{3}} C_2^{02} \right)}{\frac{2}{5} \sqrt{\frac{2}{3}} C_2^{02}} \right| \Delta E_L$$

$$+ \left| \frac{\left(\frac{2}{3} - \frac{1}{15} + \frac{1}{5} \sqrt{\frac{2}{3}} C_2^{02} \right)}{\frac{2}{5} \sqrt{\frac{2}{3}} C_2^{02}} \right| \Delta E_T \quad (5-24)$$

L'estimation de ces erreurs est fournie dans le tableau (5-4-a)

Dans le cas où l'on suppose que l'erreur sur les coefficients C_1^{mn} est négligeable, $\Delta \varepsilon_a$ et $\Delta \varepsilon_c$ sont exprimés par :

$$\Delta \varepsilon_a = \left| \frac{-\left(\frac{1}{3} - \frac{1}{15} C_2^{00} - \frac{1}{5} \sqrt{\frac{2}{3}} C_2^{02}\right)}{\frac{2}{5} \sqrt{\frac{2}{3}} C_2^{02}} \right| \Delta E_L + \left| \frac{\left(\frac{1}{3} - \frac{1}{15} C_2^{00} + \frac{1}{5} \sqrt{\frac{2}{3}} C_2^{02}\right)}{\frac{2}{5} \sqrt{\frac{2}{3}} C_2^{02}} \right| \Delta E_T \quad (5-25)$$

$$\Delta \varepsilon_c = \left| \frac{\left(\frac{2}{3} + \frac{1}{15} C_2^{00} + \frac{1}{5} \sqrt{\frac{2}{3}} C_2^{02}\right)}{\frac{2}{5} \sqrt{\frac{2}{3}} C_2^{02}} \right| \Delta E_L + \left| \frac{\left(-\frac{2}{3} - \frac{1}{15} C_2^{00} + \frac{1}{5} \sqrt{\frac{2}{3}} C_2^{02}\right)}{\frac{2}{5} \sqrt{\frac{2}{3}} C_2^{02}} \right| \Delta E_T \quad (5-26)$$

Ces valeurs sont consignées dans le tableau (5-4-b)

Le tableau (5-4) et la figure (5-4) nous montrent que $\Delta \varepsilon_a$ et $\Delta \varepsilon_c$ croissent

avec la fluence et plus $\frac{\Delta L_0}{L_0}, \frac{\Delta T_0}{T_0}, \left| \frac{\Delta C_1^{mn}}{C_1^{mn}} \right|$ sont faibles, plus $\Delta \varepsilon_a$ et $\Delta \varepsilon_c$ sont

faibles.

Les erreurs relatives correspondantes figurent également dans le tableau (5-4-a).

$$\left| \frac{\Delta \varepsilon_a}{\varepsilon_a} \right| = \left| \frac{\partial \varepsilon_a / \partial C_2^{00}}{\varepsilon_a} \right| \Delta C_2^{00} + \left| \frac{\partial \varepsilon_a / \partial C_2^{02}}{\varepsilon_a} \right| \Delta C_2^{02} + \left| \frac{\partial \varepsilon_a}{\partial E_L} \right| \Delta E_L + \left| \frac{\partial \varepsilon_a}{\partial E_T} \right| \Delta E_T \quad (5-27)$$

$$\left| \frac{\Delta \varepsilon_c}{\varepsilon_c} \right| = \left| \frac{\partial \varepsilon_c / \partial C_2^{00}}{\varepsilon_c} \right| \Delta C_2^{00} + \left| \frac{\partial \varepsilon_c / \partial C_2^{02}}{\varepsilon_c} \right| \Delta C_2^{02} + \left| \frac{\partial \varepsilon_c}{\partial E_L} \right| \Delta E_L + \left| \frac{\partial \varepsilon_c}{\partial E_T} \right| \Delta E_T \quad (5-28)$$

Dans le cas où ΔC_2^{00} et ΔC_2^{02} sont négligeables les erreurs relatives sont

exprimées par :

$$\frac{\Delta \epsilon_a}{\epsilon_a} = \left| \frac{\frac{\partial \epsilon_a}{\partial E_L}}{\epsilon_a} \right| \Delta E_L + \left| \frac{\frac{\partial \epsilon_a}{\partial E_T}}{\epsilon_a} \right| \Delta E_T \quad (5-29)$$

$$\left| \frac{\Delta \epsilon_c}{\epsilon_c} \right| = \left| \frac{\frac{\partial \epsilon_c}{\partial E_L}}{\epsilon_c} \right| \Delta E_L + \left| \frac{\frac{\partial \epsilon_c}{\partial E_T}}{\epsilon_c} \right| \Delta E_T \quad (5-30)$$

Le tableau (5-4-b) contient ces valeurs.

Il est bien connu que les méthodes de déterminations indirectes sont moins précises que les méthodes directes quand elles sont réalisables, mais on pense améliorer l'évaluation de ϵ_a et ϵ_c , en utilisant des valeurs supplémentaires des déformations macroscopiques autres que E_L et E_T , telles que : $E_N = E(\alpha = 0, \beta = 0)$, $E(90^\circ, 45^\circ)$, $E(90^\circ, 30^\circ)$ et $E(90^\circ, 60^\circ)$.

Commentaire des tableaux (5-4-a) et (5-4-b) :

Le tableau (5-4-a) présente les erreurs absolues et relatives de ϵ_a et ϵ_c dans le cas où l'on ne néglige pas ΔC_2^{00} et ΔC_2^{02} .

Le tableau (5-4-b) présente les erreurs de ϵ_a et ϵ_c dans le cas où :
 $\Delta C_2^{00} = \Delta C_2^{02} \approx 0$

Ces deux derniers tableaux nous montrent que, la précision de la détermination indirecte de ϵ_a et ϵ_c est très sensible aux coefficients ΔC_2^{00} et

ΔC_2^{02} et aux paramètres L_0 et T_0 .

Pour obtenir des valeurs précises de ϵ_c et ϵ_a il est nécessaire d'une part de minimiser les erreurs de détermination de texture liées notamment à l'estimation du fond continu et d'autre part de mesurer L_0 et T_0 avec grande précision.

ϵ_a	$1,91 \times 10^{-4} \phi t^{0,67}$
ϵ_c	$-2,66 \times 10^{-4} \phi t^{0,67}$
$\Delta\epsilon_a$	$75,69 \times 10^{-7} \phi t^{0,67} + 23,81 \times 10^{-5}$
$\Delta\epsilon_c$	$255,7 \times 10^{-7} \phi t^{0,67} + 208,5 \times 10^{-5}$
$\Delta\epsilon_a/\Delta\epsilon_a$	$1,2469 \phi t^{-0,67} + 0,03962$
$\Delta\epsilon_c/\Delta\epsilon_c$	$7,83 \phi t^{-0,67} + 0,03962$

Tableau (5-4a)

$\Delta\epsilon_a$	$17,84 \times 10^{-9} \phi t^{0,67} + 23,81 \times 10^{-5}$
$\Delta\epsilon_c$	$147,66 \times 10^{-9} \phi t^{0,67} + 208,5 \times 10^{-5}$
$\Delta\epsilon_a/\Delta\epsilon_a$	$1,2469 \phi t^{-0,67} + 9,34125 \times 10^{-5}$
$\Delta\epsilon_c/\Delta\epsilon_c$	$7,83 \phi t^{-0,67} + 55,51 \times 10^{-5}$

Tableau (5-4b)

Tableau (5-4) : Estimation des erreurs sur les déformations microscopiques moyennes dans le cas de variation de volume,

a) dans le cas où l'erreur sur les coefficients C_1^{mn} est significative.

b) dans le cas où l'erreur sur les coefficients C_1^{mn} est négligeable.

Figure (5-2) : Variation de $\Delta\epsilon_a$ et $\Delta\epsilon_c$ en fonction de la fluence.

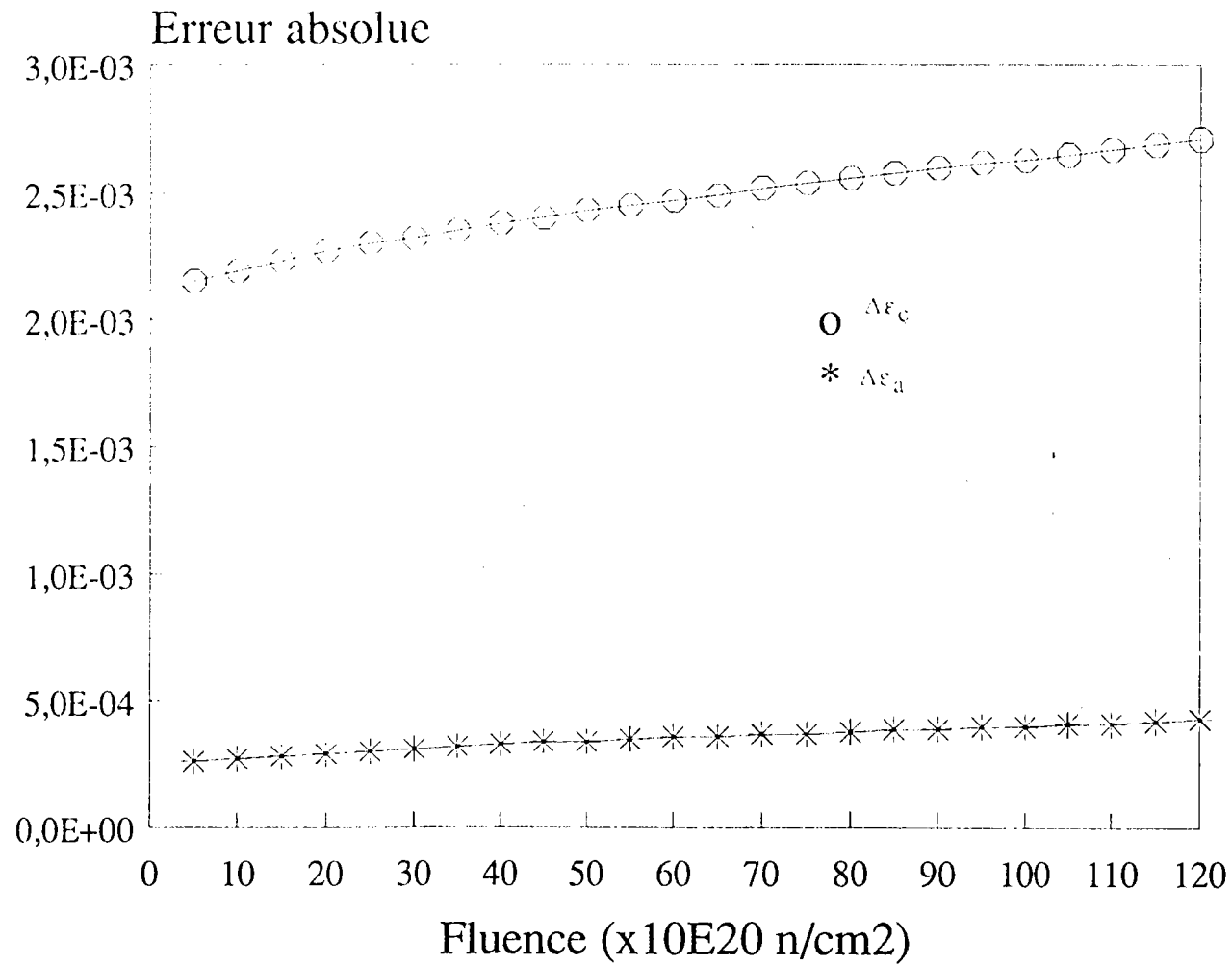
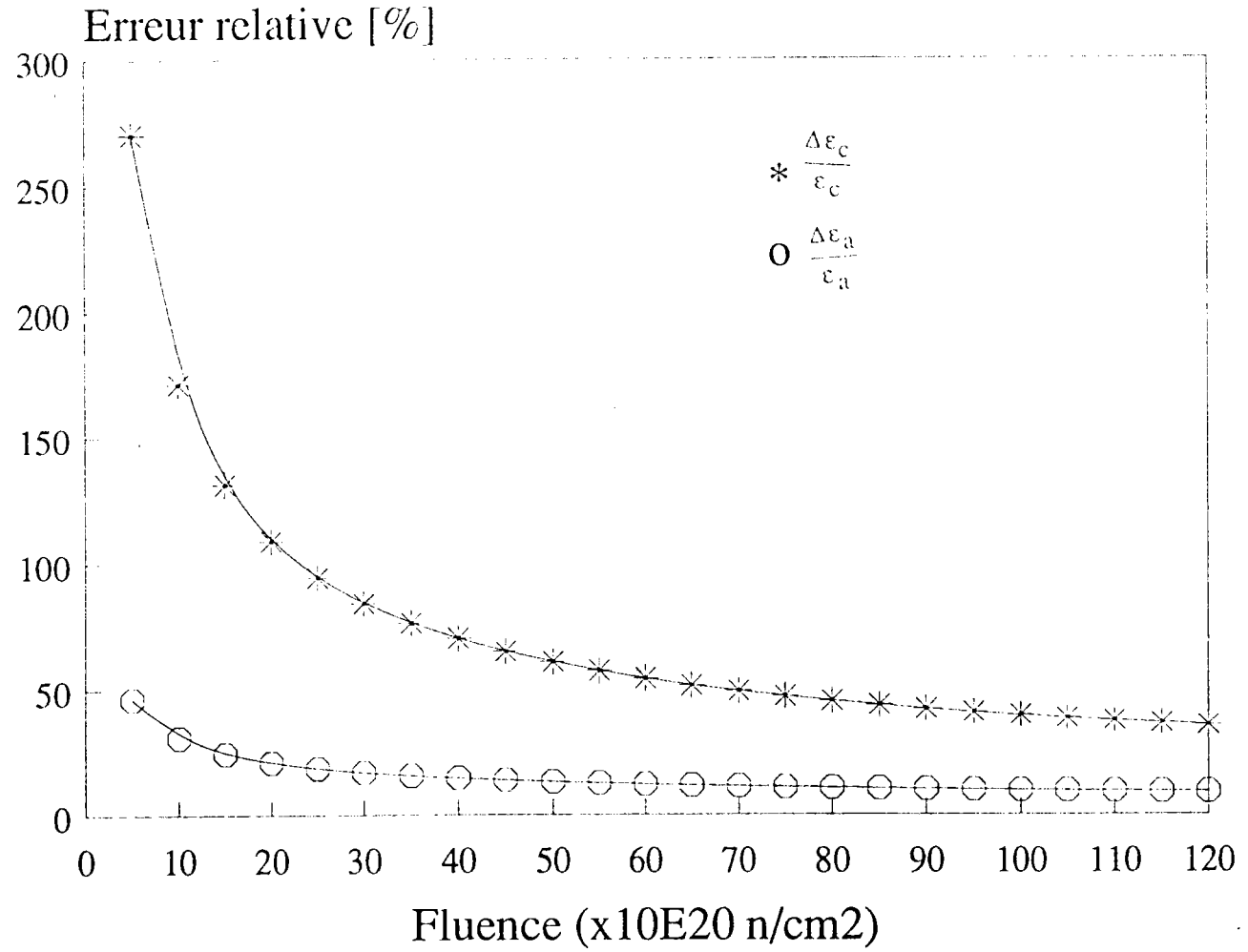


Figure (5-3) : Variation de $\frac{\Delta \epsilon_a}{\epsilon_a}$ et $\frac{\Delta \epsilon_c}{\epsilon_c}$ en fonction de la fluence



B) En cas de conservation de volume.

Dans le cas de conservation de volume, on rappelle que ϵ_a est obtenue par une technique de moindres carrés (voir éq.(5-16) :

$$\epsilon_a = \frac{E_L(1-3F_L) + E_T(1-3F_T)}{(1-3F_L)^2 + (1-3F_T)^2} = \frac{N}{D} \quad (5-31)$$

On peut donc estimer l'erreur absolue :

$$\Delta\epsilon_a = \left| \frac{(1-3F_L)}{D} \right| \Delta E_L + \left| \frac{(1-3F_T)}{D} \right| \Delta E_T + \left| \frac{-3E_L \times D + 6(1-3F_L) \times N}{D^2} \right| \Delta F_L + \left| \frac{-3E_T \times D + 6(1-3F_T) \times N}{D^2} \right| \Delta F_T \quad (5-32)$$

Les valeurs absolues et relatives sont présentées dans le tableau (5-5-a).

* Dans le cas où les erreurs sur les coefficients de texture sont négligeables

($\Delta C_2^{00} \simeq \Delta C_2^{02} \simeq 0$), on constate que les erreurs sur les coefficients de

Kearns sont aussi négligeables :

$$\Delta F_L = \Delta F_T = 0 \quad (5-33)$$

L'expression (5-33) devient :

$$\Delta\epsilon_a = \left| \frac{(1-3F_L)}{D} \right| \Delta E_L + \left| \frac{(1-3F_T)}{D} \right| \Delta E_T \quad (5-34)$$

Les résultats de $\Delta\epsilon_a$ et $\frac{\Delta\epsilon_a}{\epsilon_a}$ sont présentés dans le tableau (5-5-b).

Dans le cas de conservation de volume,

$$\Delta\epsilon_a = 2 \Delta\epsilon_c \quad (5-35)$$

on obtient :

$$\frac{\Delta\epsilon_a}{\epsilon_a} = \left| \frac{\Delta\epsilon_c}{\epsilon_c} \right| \quad (5-36)$$

On remarque que les erreurs figurant dans les tableaux (5-4 a) et (5-4-b) sont inférieures aux erreurs présentées dans les tableaux (5-5-a) et (5-5-b).

ϵ_a	$2,036 \times 10^{-4} \phi t^{0,67}$
$\Delta\epsilon_a$	$13,25231 \times 10^{-5} + 0,11505 \times 10^{-4} \phi t^{0,67}$
$\frac{\Delta\epsilon_a}{\epsilon_a}$	$0,05651 + 0,65089 \times \phi t^{-0,67}$

Tableau (5-5a)

ϵ_a	$2,036 \times 10^{-4} \phi t^{0,67}$
$\Delta\epsilon_a$	$13,25231 \times 10^{-5} + 9,658583 \times 10^{-9} \phi t^{0,67}$
$\frac{\Delta\epsilon_a}{\epsilon_a}$	$4,7439 \times 10^{-5} + 0,65089 \times \phi t^{-0,67}$

Tableau (5-5b)

Tableau (5-5) : Estimation des erreurs sur les déformations microscopiques moyennes dans le cas de conservation de volume.

a) dans le cas où l'erreur sur les coefficients C_1^{mn} est significative.

b) dans le cas où l'erreur sur les coefficients C_1^{mn} est négligeable.

5-7- DETERMINATION DU COMPORTEMENT DU MONOCRISTAL ET DE SA PRECISION DANS LE CAS DES VALEURS MAXIMALES DE E_L et E_T .

Dans le but d'encadrer avec sécurité les marges d'erreur, il est préférable de reprendre tous les calculs précédents en tenant compte des valeurs maximales de E_L et de E_T . (Les figures (4-19) et (4-20) montrent que l'on peut maximiser la loi de croissance dans la direction longitudinale par

$$E_{LMax} = 2,254 \times 10^{-4} \times \phi t^{0,67} \quad (5-37)$$

et dans la direction transverse par :

$$E_{TMax} = 1,736 \times 10^{-4} \times \phi t^{0,67} \quad (5-38)$$

L'estimation des valeurs de ϵ_{aMax} et ϵ_{cMax} et de leur précision est présentée dans le tableau (5-6). On remarque que

- Les déformations du monocristal à fluence fixée ϵ_{aMax} et ϵ_{cMax} déterminées à partir de E_{LMax} et E_{TMax} sont supérieures à celles déterminées à partir de E_L et E_T moyens.

- Les erreurs absolues de (E_{LMax} , E_{TMax} , ϵ_{aMax} , ϵ_{cMax}) sont respectivement supérieures aux erreurs absolues de (E_L , E_T , ϵ_a , ϵ_c , (moyennes)).

- Les erreurs relatives restent inchangées dans les deux cas :

$$\frac{\Delta E_{LMax}}{E_{LMax}} = \frac{\Delta E_L}{E_L}; \frac{\Delta E_{TMax}}{E_{TMax}} = \frac{\Delta E_T}{E_T}; \frac{\Delta \epsilon_{aMax}}{\epsilon_{aMax}} = \frac{\Delta \epsilon_a}{\epsilon_a}; \text{ et } \frac{\Delta \epsilon_{cMax}}{\epsilon_{cMax}} = \frac{\Delta \epsilon_c}{\epsilon_c}$$

ELMax	$[2,254 \times 10^{-2} \times \phi t^{0,67}] \%$
ETMax	$[1,736 \times 10^{-2} \times \phi t^{0,67}] \%$
ϵ_{aMax}	$2,674 \times 10^{-4} \times \phi t^{0,67}$
ϵ_{cMax}	$-3,724 \times 10^{-4} \times \phi t^{0,67}$
ϵ_{aMax} (avec $\epsilon_c + 2 \epsilon_a = 0$)	$2,85 \times 10^{-4} \times \phi t^{0,67}$
$\Delta ELMax$	$10,69 \times 10^{-9} \times \phi t^{0,67} + 13,28 \times 10^{-5}$
$\Delta ETMax$	$8,232 \times 10^{-9} \times \phi t^{0,67} + 13,28 \times 10^{-5}$
$\Delta \epsilon_{aMax}$	$105,96 \times 10^{-7} \times \phi t^{0,67} + 33,334 \times 10^{-5}$
$\Delta \epsilon_{cMax}$	$357,98 \times 10^{-7} \times \phi t^{0,67} + 291,9 \times 10^{-5}$
$\delta ELMax$	$0,075 \times 10^{-4} \times \phi t^{0,67}$
$\delta ETMax$	$0,1079 \times 10^{-4} \times \phi t^{0,67}$
$\frac{\Delta ELMax}{ELMax}$	$[4,743 \times 10^{-3} + 58,9 \phi t^{0,67}] \%$
$\frac{\Delta ETMax}{ETMax}$	$[4,743 \times 10^{-3} + 76,5 \phi t^{0,67}] \%$
$\frac{\Delta \epsilon_{aMax}}{\epsilon_{aMax}}$	$1,2469 \phi t^{0,67} + 0,03962$
$\frac{\Delta \epsilon_{cMax}}{\epsilon_{cMax}}$	$7,83 \phi t^{0,67} + 0,09612$
$\frac{\delta ELMax}{ELMax}$	3,34%
$\frac{\delta ETMax}{ETMax}$	6,21%
$\Delta \epsilon_{aMax}$ (avec $\epsilon_c + 2 \epsilon_a = 0$)	$18,5532 \times 10^{-5} + 0,161 \times 10^{-4} \phi t^{0,67}$
$\frac{\Delta \epsilon_{aMax}}{\epsilon_{aMax}}$ (avec $\epsilon_c + 2 \epsilon_a = 0$)	$0,05651 + 0,65089 \phi t^{0,67}$

Tableau (5-6) : Estimation des erreurs des déformations microscopiques et macroscopiques maximales

5-8- CONCLUSION

a) Les opérations de l'analyse de texture, ainsi qu'une mauvaise estimation du fond continu entraînent une incertitude relative sur les coefficients de texture C_l^{mn} de l'ordre de 5%, et par conséquent une erreur absolue sur les coefficients de Kearns (F_L et F_T) égale à 0,01358 dans le cas particulier de l'analyse effectuée.

b) En raisonnant sur les valeurs moyennes, les erreurs absolues ΔE_L et ΔE_T des déformations macroscopiques sont respectivement proportionnelles aux erreurs relatives $\frac{\Delta L_0}{L_0}$ et $\frac{\Delta T_0}{T_0}$. On a donc intérêt à avoir

$\frac{\Delta L_0}{L_0}$ et $\frac{\Delta T_0}{T_0}$ les plus faibles possibles, afin que ΔE_L et ΔE_T soient satisfaisants.

c) Les faibles précisions de $\frac{\delta E_L}{E_L}$ et $\frac{\delta E_T}{E_T}$, des écarts δE_L et δE_T nous laissent penser que la variation de volume est faible, ce qui est conforme pour ce matériau avec les données bibliographiques.

Pour des conditions d'irradiation telles que ($T_i = 315^\circ\text{C}$ et $\phi t \sim 10^{20} \text{ n/cm}^2$), on a une légère augmentation de volume, qui peut être probablement attribuée à une montée de dislocations.

d) Les courbes de variations de $\frac{\Delta \epsilon_a}{\epsilon_a}$ et $\frac{\Delta \epsilon_c}{\epsilon_c}$ (en fonction de la fluence) ont l'allure d'une hyperbole.

Les déterminations indirectes de ϵ_a et ϵ_c (à partir de E_L et E_T) ont été effectuées avec des précisions qui varient de la façon suivante :

* $\frac{\Delta \epsilon_a}{\epsilon_a}$ est faible dès que la fluence atteint $20 \times 10^{20} \text{ n/cm}^2$, dans le cas du

matériau étudié, alors que $\frac{\Delta \epsilon_c}{\epsilon_c}$ est beaucoup plus élevée même pour des fluences supérieures à $22 \times 10^{20} \text{ n/cm}^2$.

$\frac{\Delta \epsilon_c}{\epsilon_c}$ ne commence à devenir inférieure à 50% qu'à partir des fluences supérieures à $68,67 \times 10^{20} \text{ n/cm}^2$.

Pour réaliser des prévisions de meilleures précisions sur ϵ_a et ϵ_c il est nécessaire de traiter un plus grand nombre de données expérimentales mesurées dans plusieurs directions par rapport à la direction de référence.

e) L'amélioration de la précision de ϵ_a et ϵ_c passe aussi par une détermination très précise de la texture ainsi que des mesures d'allongement des échantillons.

f) Compte tenu de la forte dispersion des données expérimentales (voir fig. (4-19) et (4-20)), il est raisonnable d'évaluer les valeurs de ϵ_a et ϵ_c ainsi que leur précision en se référant aux valeurs expérimentales les plus élevées.

REFERENCES DU CINQUIEME CHAPITRE

- [1] N. PISKOUNOV "Calcul différentiel et intégral" Tome 2, Edition de Moscou.
- [2] Jean MOTHEs "Mesure et Statistique" T.I. R.560 - Mesure et contrôle.
- [3] J.F. BOISSEAU "Exploitation des résultats de mesure" T.I. R603, Mesure et contrôle.
- [4] M. HUMBERT et C. ESLING- Rapport de fin de contrat n° T.F. IDA.87/3978.
- [5] R.B. ADAMSON "Symposium on zirconium in nuclear industry" Québec 1976 ASTM-STP 633 p 326.
- [6] P. MORIZE "Anisotropie de Texture dans le zircaloy croissance sous irradiation et fluage" CACEMI, METZ, 1983.
- [7] S.R. Mac EWEN, JNM.54 (1974) 419.

CONCLUSION GENERALE

Le modèle prédictif de la croissance sous irradiation qui vient d'être développé est fondé sur le principe de moyenne volumique.

On suppose que la déformation macroscopique est assimilable à la moyenne des déformations des grains orientés constituant le polycristal. Avec ces hypothèses, le modèle de calcul de croissance sous irradiation devient un modèle de calcul de propriétés moyennes représentées par un tenseur de rang 2. De ce fait les calculs de croissance ne requièrent que le coefficient

C_{l}^{mn} de rang 2 de la fonction de texture avec lesquels on peut aussi exprimer les coefficients d'anisotropie encore appelés coefficients de Kearns qui sont quelquefois déterminés à partir de la figure de pôles complètes des axes \vec{c} .

Techniquement la mesure de figures de pôles complètes présente des difficultés. On préfère alors déterminer les coefficients de Kearns par les

coefficients C_{l}^{mn} de la F.D.O. obtenue à partir de figures de pôles incomplètes par "Barycentrage". Par ailleurs, cette méthode permet de limiter considérablement les erreurs statistiques de détermination.

Dans ce modèle la prévision de la déformation macroscopique est calculée à partir de la fonction de texture et du comportement monocristallin. On peut également utiliser le modèle pour évaluer le comportement monocristallin connaissant la F.D.O. et le comportement polycristallin. L'évaluation obtenue dans ce cas rend compte indirectement des interactions entre grains.

Le modèle, élaboré pour l'évaluation de la croissance sous irradiation de feuillards, est transposable pour l'évaluation de la croissance de tubes qui doivent être amincis pour pouvoir être "déroulés" sans quitter le domaine élastique.

Résultats expérimentaux.

Les valeurs numériques des déformations microscopiques que nous avons calculées pour l'échantillon ZrIL sont conformes aux valeurs de la bibliographie ; elles correspondent à une contraction le long de l'axe \vec{c} et à une expansion le long de l'axe \vec{a} .

Les extrema des déformations macroscopiques sont portés par deux directions principales de la tôle. La plus grande expansion est dirigée

suivant la direction de laminage où est orienté un grand nombre des axes \vec{a} . La plus grande contraction correspond à la direction normale. L'analyse des figures de pôles et les valeurs numériques des coefficients de Kearns montrent que le plus grand nombre des axes \vec{c} (traduit par le terme $f_N = 79\%$) est orienté selon la direction normale. L'ensemble des opérations de l'analyse de texture a entraîné une incertitude sur les coefficients de texture C_{mn} de l'ordre de 5 % et par conséquent une incertitude sur les coefficients de Kearns principaux de l'échantillon ZrIL. Dans le cas le plus défavorable, ces incertitudes sont de l'ordre de 22 %.

Les incertitudes sur ϵ_a et ϵ_c permettent de conclure que le modèle devient plus fiable lorsquela fluence augmente.

Une bonne précision de l'O.D.F. et un grand nombre de données expérimentales mesurées dans plusieurs directions de la tôle permettront une détermination de ϵ_a et ϵ_c avec de meilleures précisions.

La croissance de l'échantillon ZrIL, dans le cas le plus défavorable c'est à dire pour la fluence maximale $110.10^{20} n/cm^2$, est accompagnée d'une légère augmentation de volume de l'ordre de 0,27 %.

Les résultats des hypothèses sur la conservation de volume sont déterminés avec de bonnes précisions $(\frac{\delta E_L}{E_L} = 3\%)$ et $(\frac{\delta E_T}{E_T} = 6\%)$.

Ces résultats permettent de conclure que la croissance s'effectue à volume presque constant.

Perspectives.

Pour certains produits plats de Zircaloy qui ont subi des traitement thermomécaniques complexes le modèle ne donne pas des résultats suffisamment compatibles avec l'expérience.

Il est alors souhaitable d'améliorer le modèle en tenant compte des autres paramètres liés à la croissance.

On sait par exemple que tout ce qui favorise la recombinaison directe des lacunes et des interstitiels est favorable à une réduction de la croissance. En particulier, la présence de certaines impuretés, en réduisant la mobilité des défauts ponctuels, en piégeant un défaut, permet son annihilation ultérieure par un défaut de l'autre type, et stabilise la structure des boucles de dislocations.

La montée des dislocations est des boucles au cours de l'irradiation est généralement déclenchée par les interstitiels. Il serait donc intéressant de

réaliser les études suivantes :

- 1) des études théoriques sur l'interaction élastique entre un interstitiel et une dislocation de vecteur de Burgers (par exemple $1/3 [11\bar{2}0]$ et $[0001]$).
- 2) des études expérimentales (notamment par microscopie électronique) permettant d'apprécier quantitativement l'élimination relative des interstitiels et des lacunes sur les dislocations et les joints de grains pour différentes compositions chimiques des alliages et différents états métallurgiques.

Les résultats de ces études devraient permettre d'ajouter à la modélisation initiale la modélisation des mécanismes principaux observés durant ces études.

ANNEXE I

Calcul de la fonction de distribution axiale $A(h,y)$ en fonction des coefficients de Texture C_l^{mn}

Pour transformer le repère K_A en K_B , on introduit un repère intermédiaire K . Son axe Z peut avoir la direction y de coordonnées sphériques ϕ_A et γ_A dans le repère de l'échantillon K_A , et la direction h de coordonnées sphériques ϕ_B et β_B dans le repère K_B lié au cristal.

Soit la rotation :

$$g_1 = \left\{ \gamma_A + \frac{\pi}{2}, \phi_A, \psi \right\} \quad (\text{AI} - 1)$$

qui transforme le repère K_A en K :

$$K = g_1 K_A \quad (\text{AI} - 2)$$

et la rotation :

$$g_2 = \left\{ \psi', \phi_B, \frac{\pi}{2} - \beta_B \right\} \quad (\text{AI} - 3)$$

qui transforme le repère K en K_B :

$$K_B = g_2 K = g_2 \cdot g_1 K_A \quad (\text{AI} - 4)$$

d'où :

$$g = g_2 \cdot g_1 \quad (\text{AI} - 5)$$

Maintenant, on fixe g_1 et les angles ϕ_B et β_B de la rotation g_2 et on permet à l'angle ψ' de varier. Dans ce cas on obtient toutes les rotations, g , pour lesquelles la direction cristalline h coïncide avec la direction

d'échantillon y. On forme la valeur moyenne de la fonction de distribution des orientations sur toutes ces orientations. C'est une fonction A(h,y) de direction h et y :

$$A(h,y) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} f(g_2 \cdot g_1) d\psi' \quad (\text{AI- 6})$$

ou encore :

$$A(h,y) = \frac{1}{2\pi} \int_{[h,y]} f(g) d\psi' \quad (\text{AI- 7})$$

On remplace f(g) par son développement en série, l'équation (AI- 7) devient :

$$A(h,y) = \frac{1}{2\pi} \int_{[h,y]} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{+l} \sum_{n=-l}^{+l} C_l^{mn} T_l^{mn}(g) d\psi' \quad (\text{AI- 8})$$

ou encore :

$$A(h,y) = \frac{1}{2\pi} \sum_{lmn} C_l^{mn} \int_{[h,y]} T_l^{mn}(g) d\psi' \quad (\text{AI- 9})$$

d'après [1], on a :

$$\int_{[h,y]} T_l^{mn}(g) d\psi' = \frac{8\pi^2}{2l+1} K_l^{*m}(\phi_B \beta_B) K_l^n(\phi_A \gamma_A) \quad (\text{AI- 10})$$

En remplaçant (I-10) dans (I-8), on aura :

$$A(h, y) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{+l} \sum_{n=-l}^{+l} \frac{4\pi}{2l+1} C_l^{mn} K_l^m(h) K_l^n(y)$$

(AI- 11)

REFERENCES

- [1] H.J. BUNGE, "Texture Analysis in Materials science" Mathematical Methods, p.372. Butterworths.

ANNEXE II

Calcul des fonctions : $K_0^0(y)$, $K_2^0(y)$, $K_2^1(y)$, $K_2^2(y)$.

1)- Les harmoniques sphériques généralisées.

Les harmoniques sphériques généralisées sont définies par :

$$T_1^{mn}(g) = T_1^{mn}(\varphi_1, \phi, \varphi_2) = e^{im\varphi_2} P_1^{mn}(\cos \phi) e^{in\varphi_1} \quad (\text{AII- 1})$$

Avec :

$$P_1^{mn}(\cos \phi) = P_1^{mn}(x) = \frac{(-1)^{l-m} i^{n-m}}{2^{l-m} (l-m)!} \left[\frac{(l-m)!(l+n)!}{(l+m)!(l-n)!} \right]^{1/2} \cdot (1-x)^{-\frac{n-m}{2}} \cdot X$$

$$(1+x)^{-\frac{n+m}{2}} \frac{d^{l-n}}{dx^{l-n}} \left[(1-x)^{l-m} (1+x)^{l+n} \right] \quad (\text{AII-2})$$

En particulier :

$$T_0^{00}(g) = P_1^{00}(\cos \phi) = 1 \quad (\text{AII- 3})$$

2- Les harmoniques sphériques de surface :

Les harmoniques sphériques de surface sont définies par :

$$K_1^m(y) = K_1^m(\alpha, \beta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\beta} P_1^m(\cos \alpha) \quad (\text{AII- 4})$$

Avec $\bar{P}_l^m(\cos \alpha)$: fonctions de Legendre associées normalisées, définies par :

$$\bar{P}_l^m(\cos \alpha) = \bar{P}_l^m(x) = \sqrt{\frac{(l+m)!}{(l-m)!}} \sqrt{\frac{2l+1}{2}} \frac{(-1)^{l-m}}{2^l l!} (1-x^2)^{-m/2} \frac{d^{l-m}}{dx^{l-m}} (1-x^2)^l$$

(AII- 5)

2-a Relation entre $\bar{P}_l^m(x)$ et $\bar{P}_l^{mn}(x)$.

$$P_l^{0m}(x) = P_l^{m0}(x) = i^{-n} \sqrt{\frac{2}{2l+1}} \bar{P}_l^m(x)$$

(AII- 6)

2-b- Calcul des fonctions $K_0^0(y)$, $K_2^0(y)$, $K_2^1(y)$, $K_2^2(y)$.

A partir de l'équation (AII-6) on a :

$$\bar{P}_l^m(x) = P_l^{0m}(x) \times i^m \sqrt{\frac{2l+1}{2}} = i^m \sqrt{\frac{2l+1}{2}} P_l^{m0}(x)$$

(AII-7)

En remplaçant l'équation (AII-7) dans l'équation (AII-4), on aura :

$$K_l^m(\alpha, \beta) = \frac{i^m}{\sqrt{2\pi}} \sqrt{\frac{2l+1}{2}} \cdot P_l^{0m}(x) \cdot e^{im\beta}$$

(AII-8)

$$K_0^0(\alpha, \beta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{\sqrt{2}} P_0^{00}(x) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

(AII-9)

Les valeurs des fonctions $P_2^{mn}(\cos \alpha)$ sont données par le tableau (AII-1),

où l'angle α est remplacé par l'angle Φ dans le tableau.

$$K_2^0(\alpha, \beta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sqrt{\frac{5}{2}} P_0^{00}(\cos \alpha) = \sqrt{\frac{5}{4\pi}} \times \frac{1}{2} (3 \cos^2 \alpha - 1) \quad (\text{AII-10})$$

$$K_2^1(\alpha, \beta) = \frac{i}{\sqrt{2\pi}} \sqrt{\frac{5}{2}} e^{i\beta} (-i \sqrt{\frac{3}{2}} \sin \alpha \cos \alpha) = \sqrt{\frac{5}{4\pi}} \cdot e^{i\beta} \cdot \sqrt{\frac{3}{2}} \sin \alpha \cos \alpha \quad (\text{AII-11})$$

$$K_2^2(\alpha, \beta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sqrt{\frac{5}{2}} \cdot e^{i2\beta} \left(\frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{2}} (1 - \cos^2 \phi) \right) = \sqrt{\frac{5}{4\pi}} \cdot e^{i2\beta} \cdot \frac{1}{2} \cdot \sqrt{\frac{3}{2}} (1 - \cos^2 \phi) \quad (\text{AII-12})$$

REFERENCES

- [1] H.J. BUNGE "Texture analysis in materials science" Butterworths 1982.

ANNEXE III

DETERMINATION DE LA CROISSANCE MOYENNE D'UN POLYCRISTAL

Pour déterminer la croissance moyenne d'une tôle polycristalline de Zircaloy dans une direction y (α, β) (figure (3-6)), il suffit d'imposer les conditions des équations (3-13), (3-16) et (3-20) à l'expression générale de la moyenne équation (3-12), on obtient alors :

$$E(y) = \sum_{l=0}^2 \sum_{n=-l}^{+l} \frac{1}{2l+1} C_l^{0n} e_l^0 K_l^n(y) \quad (\text{AIII-1})$$

$$E(y) = C_0^0 C_0^{00} K_0^0(y) + \frac{e_2^0}{5} \sum_{n=-2}^{+2} C_2^{0n} K_2^n(y) \quad (\text{AIII-2})$$

Sachant que $e_0^0 = \sqrt{\frac{4\pi}{3}} (\epsilon_c + 2\epsilon_a)$ et $e_2^0 = 2\pi \sqrt{\frac{2}{5}} \cdot \frac{2}{3} (\epsilon_c - \epsilon_a)$, l'équation

(AIII-2) devient alors :

$$E(y) = \frac{\sqrt{4\pi}}{3} (\epsilon_c + 2\epsilon_a) C_0^{00} K_0^0(y) + \frac{2\pi}{5} \sqrt{\frac{2}{5}} \cdot \frac{2}{3} (\epsilon_c - \epsilon_a) \sum_{n=-2}^{+2} C_2^{0n} K_2^n(y) \quad (\text{AIII-3})$$

$$E(y) = \epsilon_c \left(\frac{\sqrt{4\pi}}{3} C_0^{00} K_0^0(y) + \frac{2\pi}{5} \sqrt{\frac{2}{5}} \cdot \frac{2}{3} (\epsilon_c - \epsilon_a) \cdot \sum_{n=-2}^{+2} C_2^{0n} K_2^n(y) \right) +$$

$$\epsilon_a \left(\frac{2\sqrt{4\pi}}{3} C_0^{00} K_0^0(y) - \sum_{n=-2}^{+2} C_2^{0n} K_2^n(y) \right)$$

(AIII-4)

Posant :

$$W(y) = \frac{\sqrt{4\pi}}{3} C_0^{00} K_0^0(y) + \frac{2\pi}{5} \sqrt{\frac{2}{5}} \cdot \frac{2}{3} \sum_{n=-2}^{+2} C_2^{0n} K_2^n(y) \quad (\text{AIII-5})$$

L'équation (AIII-4) devient :

$$E(y) = \epsilon_c W(y) + (1 - W(y)) \epsilon_a \quad (\text{AIII-6})$$

$C_0^{00} = 1$ grâce à la condition de normalisation de la F.D.O. , les fonctions

$K_1^n(y)$ nécessaires au calcul de la croissance moyenne sont données en

annexe II et en exploitant respectivement les propriétés de conjugaison :

$$C_l^{m-n} = (-1)^{l+m+n} C_l^{-mn} *$$

$$K_l^{-n}(y) = (-1)^{l+n} K_l^n(y) *$$

On peut exprimer $W(y)$ par :

$$W(\alpha, \beta) = \frac{1}{3} + \frac{1}{15} C_2^{00} (3 \cos^2 \alpha - 1) + \frac{2}{5} \sqrt{\frac{2}{3}} \sin \alpha \cos \alpha \left[\text{Re} C_2^{01} \cos \beta - \text{Im} C_2^{01} \sin \beta \right] + \frac{1}{5} \sqrt{\frac{2}{3}} (1 - \cos^2 \alpha) \left[\text{Re} C_2^{02} \cos^2 \beta - \text{Im} C_2^{02} \sin 2\beta \right]$$

(AIII-7)

En tenant compte de la symétrie orthorhombique des échantillons, les coefficients $\text{Re} C_2^{01}$ et $\text{Im} C_2^{01}$ disparaissent. Le coefficient $\text{Im} C_2^{02}$ est nul.

Comme le référentiel est porté par les axes de symétrie, l'équation (AIII-7) se simplifie :

$$W(\alpha, \beta) = \frac{1}{3} + \frac{1}{15} (3\cos^2 \alpha - 1) C_2^{00} + \frac{1}{5} \sqrt{\frac{2}{3}} \cos^2 \beta (1 - \cos^2 \alpha) \operatorname{Re} C_2^{02} \quad (\text{AIII-8})$$

La fonction $W(\alpha, \beta)$ n'est autre que le fameux coefficient de Kearns $f(\alpha, \beta)$ suivant une direction $y(\alpha, \beta)$ de la tôle.