



Vers une modélisation plus précise des matériaux combustibles sous irradiation : Théorie de la fonctionnelle de la densité et modèles d'agrégats.

Spécialité Physique moléculaire

Niveau d'étude Bac+5

Formation Master 2

Unité d'accueil

Candidature avant le 31/03/2017

Durée 4 mois

Poursuite possible en thèse oui

Contact [BRENNER Valérie](#)
+33 1 69 08 37 88
valerie.brenner@cea.fr

Résumé

Agrégats : modèles de matériaux d'intérêt nucléaire et liaisons non-covalentes
Théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) et méthodes "Coupled Cluster" (CCSD(T))
Base des simulations multi-échelle développées pour étudier les matériaux combustibles sous irradiation.

Sujet détaillé

Les méthodes de modélisation à l'échelle atomique constituent la base de l'approche multi-échelle développée dans les codes de performances des combustibles et peuvent apporter des informations indispensables pour améliorer la compréhension des mécanismes élémentaires gouvernant les propriétés des matériaux nucléaires. La description des matériaux combustibles sous irradiation est cependant délicate et nécessite des développements particuliers en raison d'une part, des propriétés particulières des matériaux eux-mêmes et d'autre part, de la complexité des phénomènes engendrés par l'irradiation: création de défauts ponctuels et étendus, production d'hélium et de fragments de fission, dont des gaz rares. Les calculs de structure électronique effectués dans le cadre de l'approche multi-échelle utilisent la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT). Les approximations traditionnelles de cette théorie ne décrivent pas correctement les interactions dues aux forces dispersives nommées aussi interactions de van der Waals et ces interactions sont responsables de nombreux phénomènes structuraux et énergétiques et jouent un rôle important dans la description des interactions produits de fission - matériaux nucléaires.

L'objectif de ce stage est la mise en oeuvre et le test de nouvelles approches de DFT améliorant le traitement des interactions de van der Waals par comparaison avec des calculs utilisant une des méthodes les plus sophistiquées de la chimie quantique, la méthode CCSD(T) (Coupled cluster singles-doubles with triples amplitudes by perturbation theory) et ses nouvelles approximations. Des systèmes modèles plus réalistes que ceux utilisés actuellement, i.e. des systèmes gaz rare - molécule, seront développés afin de simuler le comportement des produits de fission et de l'hélium dans le carbure de silicium (SiC), matériau d'intérêt dans le domaine du nucléaire. Ces systèmes seront de petits agrégats représentant 1 ou 2 couches de coordination du gaz rare, morceaux de matériaux issus des simulations en solide. Ces modèles d'agrégats permettront de mieux comprendre la localisation, la migration et

l'agglomération éventuelle des produits de fission et de l'hélium conduisant à la dégradation des propriétés macroscopiques du matériau SiC. L'objectif à plus long terme est de déterminer la meilleure approche possible pour la modélisation de solides tels que les matériaux combustibles sous irradiation et ainsi améliorer la précision des codes de performances des combustibles. Ce stage s'effectuera d'ailleurs dans le cadre d'une collaboration avec une équipe du CEA Cadarache, équipe où l'approche multi-échelle est développée pour améliorer les codes de performances des combustibles.

Mots clés

Chimie-Physique, Modélisation, Physique de la matière condensée

Compétences

Simulation numérique - Station de travail locale et/ou Supercalculateur

Logiciels

Logiciels de Chimie quantique et de visualisation

Toward a better simulation of the nuclear materials under irradiation : Density functional theory and clusters

Summary

Computational study of clusters : models of nuclear materials and non-covalent interactions.
Density functional theory (DFT) and Coupled cluster methods (CCSD(T)).
First step of multi-scale simulations of nuclear materials under irradiation.

Full description

Keywords

Physical Chemistry, Simulation

Skills

Simulation - Workstations and/or supercomputer Quantum chemistry tools

Softwares

Logiciels de Chimie quantique et de visualisation