

Mercredi 11 Janvier 2017 à 14h

Salle de réunion du SRMP – Bâtiment 520 - Pièce 109

Conception de solutions solides résistantes à l'irradiation par addition d'impuretés

***Thomas Schuler, Dallas Trinkle, Pascal
Bellon, Robert Averback***

*Department of Materials Science and Engineering, University of Illinois at
Urbana-Champaign, Illinois 61801, USA*

Nous avons développé une approche multi-échelle pour quantifier l'augmentation de la fraction de défauts ponctuels recombinaison sous irradiation lorsqu'on y ajoute des solutés en faibles quantités. Cette méthodologie met en avant les paramètres qui contrôlent la fraction de défauts recombinaison et fournit des critères qui permettent d'identifier les solutés pertinents.

En s'appuyant sur une base de données de coefficients de diffusion, nous avons identifié l'antimoine comme un bon candidat pour augmenter la résistance à l'irradiation d'une solution solide de cuivre. Précisons que l'alliage Cu(Sb) est ici un système modèle qui permet de démontrer le potentiel de notre approche.

Nous avons alors réalisé des calculs ab initio pour obtenir les énergies de liaison et de migration des atomes de Sb, des lacunes et des auto-interstitiels dans différentes configurations. Ces données sont ensuite utilisées dans le formalisme de champ-moyen auto-cohérent pour obtenir des coefficients de transport qui contrairement aux études précédentes prennent en compte toutes les trajectoires des lacunes autour des solutés. Enfin, ces paramètres nous permettent de calculer la fraction de défauts recombinaison en fonction du flux d'irradiation, de la température et de la densité de puits du système, en s'appuyant sur des équations de cinétique chimique homogène.

Grâce à cette étude, nous avons identifié deux mécanismes à l'échelle atomique qui permettent d'augmenter la fraction de défaut recombinaison : à basse température, les solutés ralentissent les lacunes (effet cinétique), tandis qu'à haute température, les solutés stabilisent les lacunes dans la solution solide (effet thermodynamique).

Les visiteurs de nationalité étrangère hors Union Européenne sont priés de bien vouloir avertir impérativement 3 semaines à l'avance, et ceux de l'Union Européenne 1 ou 2 jours avant le séminaire, le Secrétariat du Service de leur entrée sur le Centre : Tel : 01 69 08 66 64 - Fax : 01 69 08 68 67.

Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives
DEN/DANS/DMN Service de Recherches de Métallurgie Physique
Centre de Saclay – Bât. 520 - 91191 Gif-sur-Yvette Cedex – France

Séminaires - Martine Logé ■ 01 69 08 51 67 et Manuel Athènes ■ 01 69 08 37 69

