

DIRECTION DES SCIENCES DE LA MATIERE,  
INSTITUT RAYONNEMENT MATIÈRE DE SACLAY

SERVICE DE PHYSIQUE ET DE CHIMIE DES SURFACES ET DES INTERFACES

# SEMINAIRE \*

Vendredi 23 Janvier 2008 à 11h00

Bâtiment 466, salle 111 - CEA Saclay, 91191, Gif sur Yvette

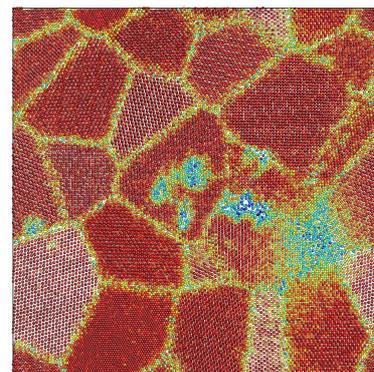
**Étude par simulations de dynamique moléculaire de l'endommagement  
sous irradiation de matrices mono-, bi- et poly-cristallines d'UO<sub>2</sub>.**

**Laurent Van Brutzel**

**Laboratoire de Modélisation Thermodynamique et Thermochimique, CEA-Saclay**

Invité par Daniel Bonamy

**Abstract :** Bien que le dioxyde d'uranium (UO<sub>2</sub>) soit le combustible nucléaire le plus utilisé dans les centrales actuelles, on connaît encore peu de chose sur son comportement microscopique sous irradiation. Ceci est en partie dû au fait que les expériences nécessaires pour une telle compréhension sont difficiles et très coûteuses à réaliser à cette échelle de longueur. La modélisation à l'échelle atomique peut alors répondre à certaines questions et permettre de comprendre les phénomènes physiques de base qui sont mis en jeu à ces échelles. La technique de modélisation par dynamique moléculaire s'est avérée être un excellent outil pour étudier la création des défauts ponctuels sous irradiation. Une série de cascades de déplacements initiées avec des énergies allant jusqu'à 80 keV a donc été réalisée afin d'étudier les premières étapes de la création de dommages d'irradiation dans des matrices d'UO<sub>2</sub> mono- et poly-cristallines.



La première étape de cette étude a été de comprendre la création des dommages primaires dans un monocristal d'UO<sub>2</sub>. Il a été trouvé que, en accord avec les données expérimentales, aucune amorphisation n'apparaît à la fin des cascades même si au cours de la pointe thermique une fusion partielle de la matrice a lieu. Seuls quelques défauts de paires de Frenkel subsistent en nombre inférieur à celui prédit par la théorie NRT. Ce résultat est dû en grande partie aux nombreux recuits et recombinaisons des défauts ponctuels créés. En outre, pour les cascades de plus grandes énergies, des agrégats de lacunes se forment principalement au centre de la cascade. Ceux-ci pourraient servir de précurseur à la formation des bulles de gaz de fission. À partir de ces résultats, la valeur du coefficient de diffusion athermique a pu aussi être estimée.

Puisque le matériau réel est un système poly-cristallin, une deuxième étape de cette étude a été de regarder l'influence de joints de grains sur la production de ces défauts ponctuels. Des joints de grains de flexion symétrique ont été simulés avec des angles de désorientation compris entre 12,68° et 61,92°. Premièrement, les propriétés structurales de ces joints de grains ont été déterminées. Il a été trouvé que la structure à l'interface dépend de la valeur de l'angle de désorientation. Cette différence de structure engendre des comportements différents sous irradiation. La morphologie générale des cascades initiées à proximité des joints possédant des petits angles de désorientation est identique à celle de cascades initiées dans un monocristal. Par contre la morphologie des cascades initiées à proximité de joints de grains possédant des angles de désorientation supérieurs à 16° est grandement modifiée.

Finalement, les dommages créés par cascades de déplacements ont été étudiés dans une matrice poly-cristalline procédant des grains orientés de manière aléatoire. La population de défauts créés ainsi que les changements structuraux aux interfaces seront discutés.

**\* SERA PRECEDE D'UNE PAUSE-CAFE A PARTIR DE 10H30**

*Formalités d'entrée :* Contacter le secrétariat pour l'établissement de votre autorisation d'entrée sur le centre de Saclay. Tel : 01.69.08.65.32 ou 01.69.08.40.12; Fax : 01.69.08.40.44 ; e-mail : catherine.julien@cea.fr. Le délai minimum est de 24 heures pour les visiteurs ressortissants des pays de l'Union Européenne, et de huit jours pour les autres. Sans autorisation, vous ne pourrez entrer sur le centre de Saclay. Dans tous les cas, se munir d'une pièce d'identité.