

**Mardi 25 Mai 2021 à 10h30**

**Salle virtuelle du SRMP – lien zoom envoyé par mail**

---

## **MODÉLISATION PAR CALCUL DE STRUCTURE ÉLECTRONIQUE DE L'INFLUENCE DE L'AMÉRICIUM DANS LES COMBUSTIBLES NUCLÉAIRES OXYDES**

***Martin Talla***

L'oxyde mixte uranium-plutonium (MOX) avec une teneur en plutonium d'environ 25% est le combustible de référence des futurs réacteurs nucléaires de génération IV (à neutrons rapides). Ce combustible nucléaire sera fabriqué à partir de combustible usé provenant des réacteurs à eau pressurisée (REP), et par conséquent, contiendra de l'américium en faible pourcentage. La question qui émerge est celle de savoir si la présence de l'américium affectera les performances et la sûreté du combustible MOX. Il faut noter que le multirecyclage étant envisagé dans le cas des REP utilisant le MOX (%Pu ~ 10) comme combustible, la même problématique se pose également pour les REP. Ainsi, une meilleure mise en évidence des effets induits par la présence de l'américium sur les propriétés de l'oxyde mixte d'uranium plutonium est donc nécessaire pour maîtriser les conséquences de la présence de cet élément sur la sûreté et la performance des combustibles. Cette étude consiste à déterminer l'influence d'une faible teneur en américium sur les propriétés structurales, électroniques, élastiques, en température finie et les défauts ponctuels des oxydes mixtes (U,Pu)O<sub>2</sub> par calculs de structure électronique, avec la méthode DFT+U. Pour cela, nous avons commencé par l'étudier les oxydes purs d'américium (AmO<sub>2</sub> et Am<sub>2</sub>O<sub>3</sub>) afin d'adapter la méthode DFT+U aux oxydes contenant de l'américium, puis de prédire certaines propriétés d'intérêt manquantes ou mal connues de AmO<sub>2</sub> et Am<sub>2</sub>O<sub>3</sub> oxydes. Une fois la méthode DFT+U mise en oeuvre dans les oxydes d'américium purs, nous l'avons appliqué à (U,Pu,Am)O<sub>2</sub> afin de déterminer l'effet de Am. Cependant, étant donné la complexité du système quaternaire U-Pu-Am-O et des données très rares sur ce composé, nous avons choisi d'étudier d'abord (U, Am)O<sub>2</sub>. Nous montrons que la présence d'américium facilite la formation de lacunes d'oxygène dans (U, Pu)O<sub>2</sub>. De plus, l'américium induit une légère diminution du paramètre de maille de (U,Pu,Am)O<sub>2</sub> mais cette diminution n'est pas linéaire comme dans (U,Pu)O<sub>2</sub>. Enfin, nous montrons que l'Am induit un état de valence particulier des cations, en particulier une oxydation partielle de U(+IV) en U(+V).