

Simulations atomistiques de l'UO₂ dopé au chrome, nouveau combustible dit tolérant aux accidents nucléaires (ATF)

jeudi 27 avril 2023 15:30 (30 minutes)

Framatome développe un concept de combustible ATF (accident tolerant fuel) basé sur le dopage à l'oxyde de chrome du dioxyde d'uranium. L'objectif de ma thèse est d'examiner l'impact du chrome sur les mécanismes de diffusion de deux produits de fission, césium et molybdène, connus pour leur volatilité et pour leur influence sur la chimie du combustible, notamment sur le relâchement de l'iode en conditions accidentelles. Les études sont réalisées à l'échelle atomique par dynamique moléculaire avec le code LAMMPS et nous utilisons le nouveau potentiel SMTB-QB pour décrire le comportement de l'UO₂ dopé chrome. Dans un premier temps, nous avons vérifié nos paramétrisations pour les liaisons Cr-O et U-O sur différentes propriétés du Cr₂O₃ et de l'UO₂. Dans un deuxième temps, nous pourrions étudier les mécanismes de diffusion du Cs et du Mo dans l'UO_{2±x} dopé au chrome, en comparaison à l'UO_{2±x} non-dopé afin d'établir l'impact du chrome. Nous pourrions ainsi déterminer les coefficients de diffusion de ces espèces dans ces nouveaux combustibles ce qui permettra d'enrichir le code de relâchement de l'IRSN (MFPR-F) et de préparer à l'évaluation de sûreté de ces futurs combustibles.

Orateur: ROUBILLE, Théo