

HYDROGÈNE & DÉFAUTS ÉTENDUS DU BÉRYLLIUM : OXYDE ET JOINTS DE GRAINS

TRAVAUX EN COURS ET A VENIR POUR LA SURETÉ DE L'INSTALLATION ITER

Aurélien Riot, François Virot – IRSN
Damien Connétable – CIRIMAT Toulouse

Colloque FR-FCM – 20/05/2022

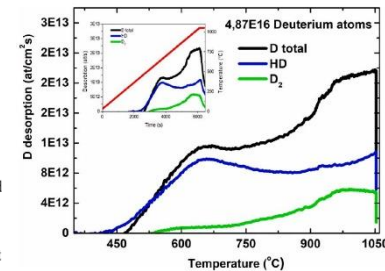
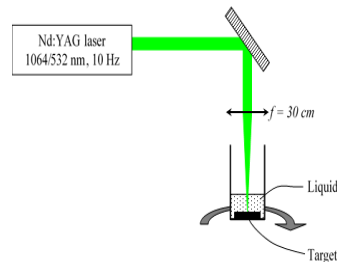
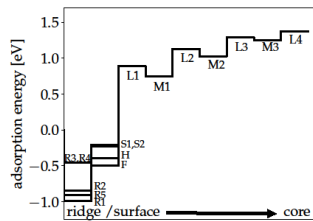
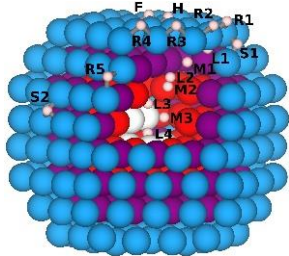
Contexte

✓ motivation

- *tritium* quantité significative « d'imbrulé »
- *poussières* érosion des parois internes à la chambre à vide
- *béryllium* choisi comme matériau de 1^{ère} paroi
 - bonne conductivité thermique, affinité avec l'oxygène ...
 - « faible » rétention du tritium
 - mais élément très toxique (poussières d'oxyde)
- **efforts portés sur le système chimique Be-T-O**

✓ 1^{er} objectif de sûreté : évaluer les quantités et la spéciation chimique des rejets à l'environnement

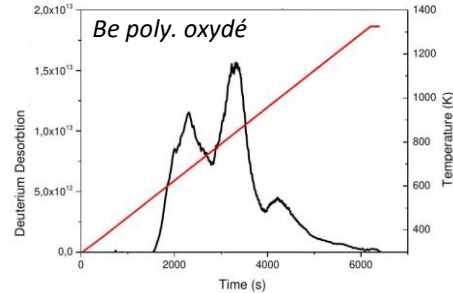
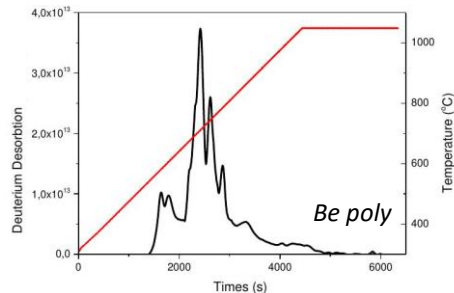
- simulation des scénarios accidentels (code ASTEC)
- composition et comportement des poussières
 - rétention du tritium dans nanoparticules de Be
 - approches computationnelle^(a) (Univ Patras) et expérimentale^(b) (INFLPR)



^(a) Chronis, *et al.*, J. Nucl. Mater. 566, 153782 (2022) ^(b) Yehia, *et al.*, Nucl. Mater. Ener. 31, 101160 (2022)

Contexte

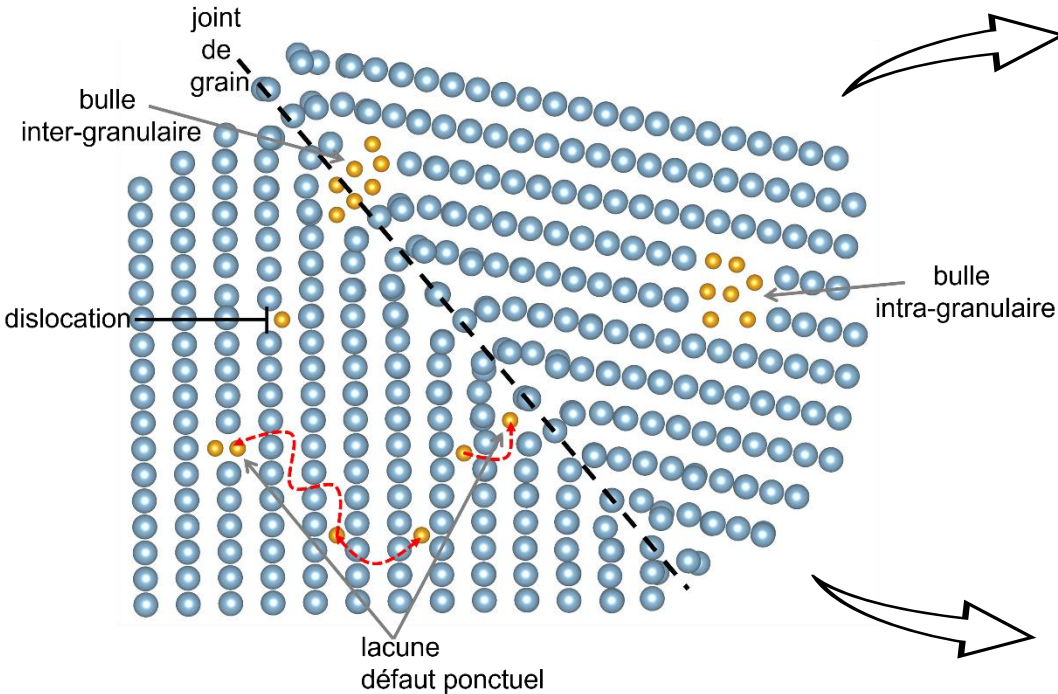
- ✓ **2nd objectif de sûreté** : suivre l'inventaire en tritium en fonctionnement normal dans la chambre à vide
 - réactivité du tritium avec les matériaux
 - interactions T-Be différentes selon matériaux (1^{ère} paroi, poussière, couche co-déposée)
 - formation de phases tritiées-bérylliées ? (hydrure, hydroxyde)
 - **expertiser la stratégie d'étuvage** des parois pour la récupération du tritium
 - améliorer la compréhension des mécanismes de désorption thermique du tritium
 - expériences d'irradiation au deutérium puis désorption thermique^(a) (INLFPR)



- maquette d'outil de simulation réaction-diffusion couplées

^(a) publication in progress (2022)

Phénomènes à modéliser & approches théoriques



DFT VASP/VTST/Phonopy

➤ propriétés

- ✓ structurale : site d'insertion, migration
- ✓ électronique : E_{sol} , E_a
- ✓ vibrationnelle : phonon-DOS

modèles thermo/cinétique

- ✓ solubilité
- ✓ coefficient de diffusion (ex : KMC)

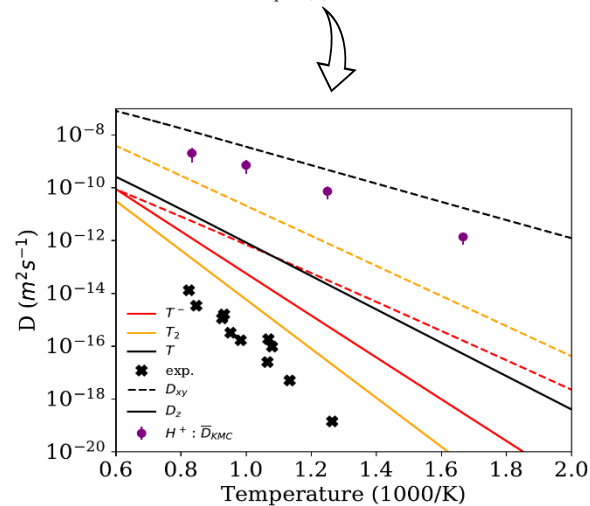
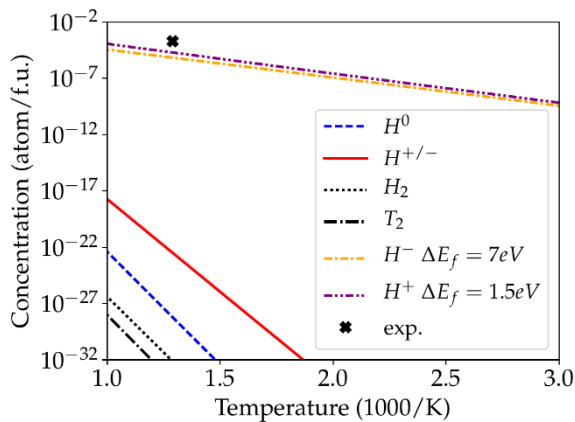
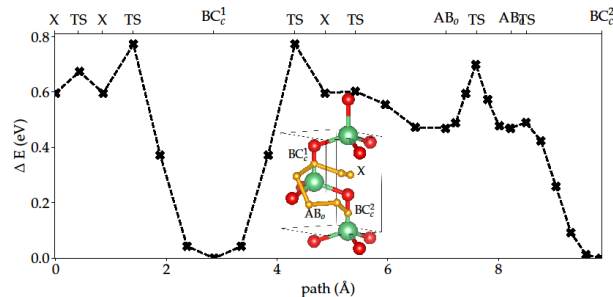
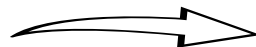
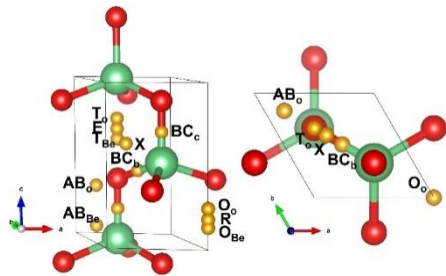
potentiel empirique LAMMPS/ATOMSK

- ✓ propriété structurale de systèmes « étendus »

Thèse 2019-2022 : interaction de ^xH avec les défauts étendus du béryllium

- ✓ oxyde de béryllium : solubilité et diffusion de ^xH
- ✓ béryllium métallique : piégeage de ^xH au voisinage de joints de grains

Solubilité et diffusion de ^xH dans BeO

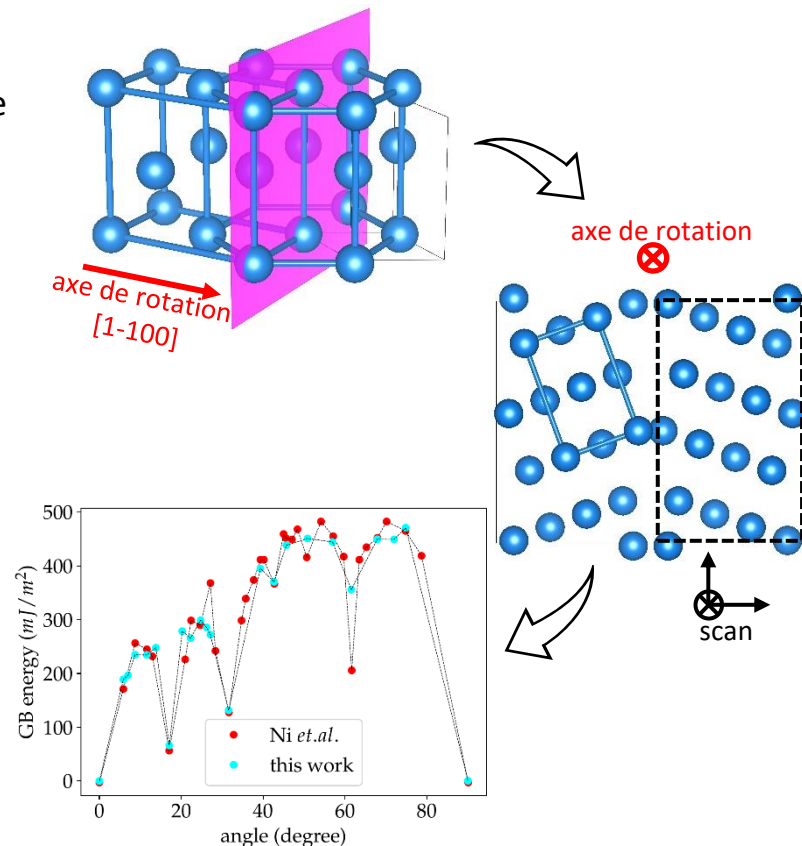


à venir :

- ✓ effet important du niveau de Fermi sur la solubilité → défauts ponctuels intrinsèques chargés à inclure
- ✓ introduction des données de base acquises dans l'outil de réaction-diffusion couplées

Jointes de grains du béryllium métallique

- ✓ cartographier les sites d'insertion du tritium aux joints de grains et évaluer les énergies de piégeage
- ✓ focus sur les joints de grains (HCP) de flexion symétrique
- ✓ explorer plusieurs directions de rotation en potentiel empirique
 - validation de la démarche sur Mg^(a)
- ✓ application sur le béryllium en cours
 - axes [0001], [1-100] et [1-101]
 - énergies de piégeage de ^xH en DFT
- ✓ à venir :
 - ✓ diffusion longitudinale aux joints du tritium
 - ✓ potentiel empirique Be-O-H à charge variable
 - ✓ ségrégation et réactivité ^xH et O aux joints de grains



(a) Ni, *et al.*, Scripta Materialia 109, 94 (2015)

Remerciements & collaborations

