

Contribution à l'étude du comportement du tritium dans le béryllium (contexte ITER)

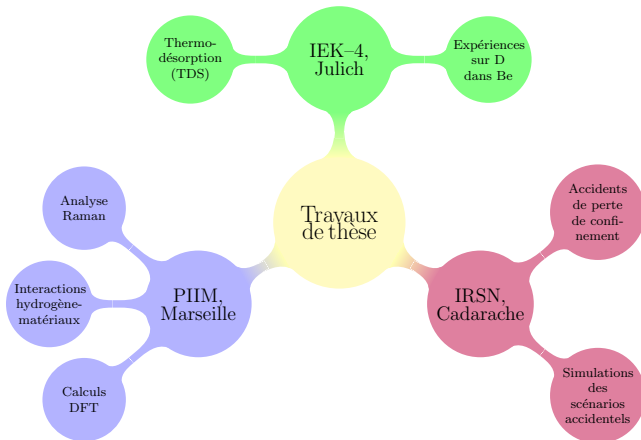
Laura Ferry

IRSN/PSN-RES/SAG/LETR
Aix-Marseille Université/PIIM

Colloque de prospective de la FR-FCM, 25 novembre 2016

Encadrants : François Virot - Marc Barrachin | Directeur : Yves Ferro

- **Deux enjeux :**
 - ▷ Suivi de l'inventaire en tritium en **fonctionnement nominal**
 - ▷ Prédire le comportement du tritium en **conditions accidentelles**
- **Travaux de thèse :** Etudier le comportement du tritium dans le béryllium
 - ▷ Mécanismes de rétention et de désorption → Sujet de recherche commun



Objectif : Comprendre le comportement du tritium dans le béryllium

Stratégie :

I. Expériences en laboratoire

1. Spectroscopie TDS
2. Spectre expérimental
3. Modélisation

II. Modèle théorique de béryllium

1. Méthodologie
2. Approche super-cellule

III. Les défauts dans le béryllium

1. Monolacunes
2. Bilacunes
3. Auto-interstitiels

IV. Système béryllium–hydrogène

1. Insertion de l'hydrogène
2. Diffusion de l'hydrogène

V. Retour vers les spectres TDS

1. Données DFT dans le modèle
2. Spectre TDS modélisé
3. Interprétation des mesures

Conclusions

Objectif : Comprendre le comportement du tritium dans le béryllium

Stratégie :

I. Expériences en laboratoire

1. Spectroscopie TDS
2. Spectre expérimental
3. Modélisation

II. Modèle théorique de béryllium

1. Méthodologie
2. Approche super-cellule

III. Les défauts dans le béryllium

1. Monolacunes
2. Bilacunes
3. Auto-interstitiels

IV. Système béryllium–hydrogène

1. Insertion de l'hydrogène
2. Diffusion de l'hydrogène

V. Retour vers les spectres TDS

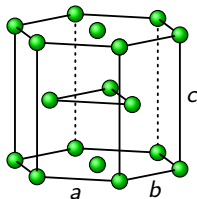
1. Données DFT dans le modèle
2. Spectre TDS modélisé
3. Interprétation des mesures

Conclusions

I. Modèle théorique de béryllium

□ Structure cristallographique :

- ▶ phase α hexagonale compacte (hcp) $T < 1250$ ° C
- ▶ phase β cubique centrée $1250 < T < 1287$ ° C
→ Phase α dans ITER



□ Théorie de la Fonctionnelle de la Densité (DFT)

- ▶ Fonctionnelle d'échange-corrélation PBE de type GGA
- ▶ Pseudo-Potentiel Ultra-Soft (USPP) et base d'ondes planes
- ▶ Code de calcul : Quantum Espresso
- ▶ $E_{\text{cut}} = 408$ eV et grille de points k $18 \times 18 \times 18$

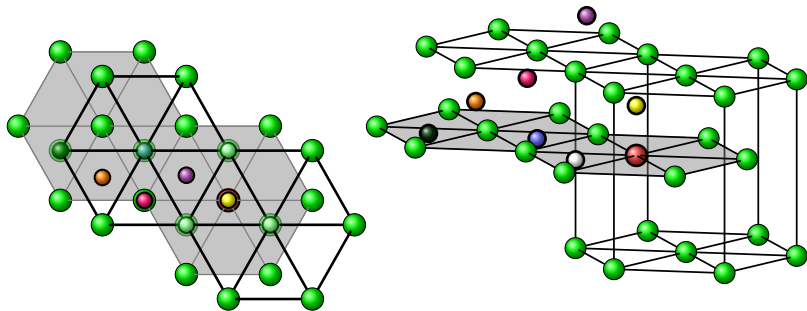
□ Validation du pseudo-potentiel : calcul des propriétés physiques du béryllium

	$a = b$ (Å)	c/a	$E_{\text{cohésion}}$ (eV)	B (GPa)
Ce travail	2,258	1,572	3,70	121
Expérience	2,286 [1]	1,568 [1]	3,32 [2-3]	121 [4]

Accord acceptable entre les valeurs calculées et les données expérimentales

[1] JNM 8, 263 (1963) [2] Thermodynamic properties of individual substances, 4th edition (1989)

[3] J. Phys. Chem. Data 14 (1985) [4] J. Appl. Phys. 95, 2436 (2004)

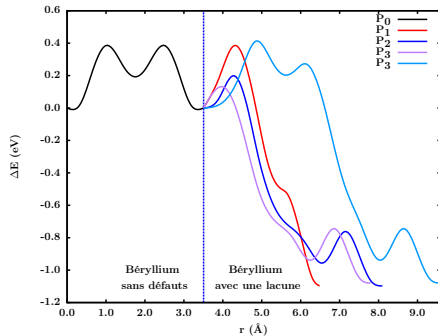
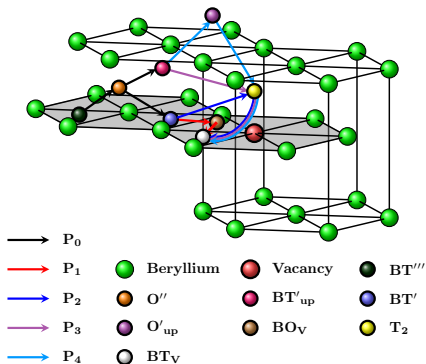


Sept sites stables au voisinage d'une lacune

Energies de solution :

Sites	BT _v	T ₂	BT' _{up}	BT'	BT'''	O''	O' _{up}
$\Delta_{sol} E^{HV}$ (eV)	1,31	1,45	2,38	2,40	2,44	2,54	2,59

▶ Insertion de l'hydrogène favorisée par la présence de lacunes



□ Chemins de diffusion au voisinage de la lacune : P₁, P₂, P₃ et P₄

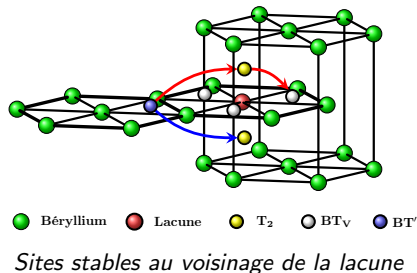
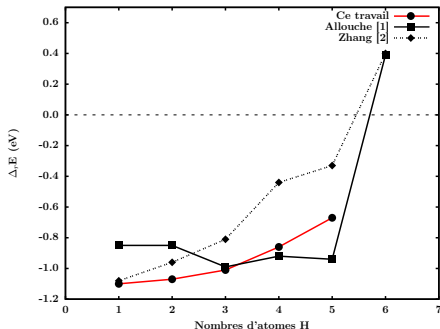
Energies	P ₁	P ₂	P ₃	P ₄	Zhang [1]	Allouche [2]
E _{piég} (eV)	0,39	0,20	0,12	0,41	0,24	0,85
E _{dépiég} (eV)	1,48	1,30	1,23	1,50	1,24	1,70

P₂ et P₃ les chemins les plus favorables

[1] J. Phys.: Condens. Matter 24, 095004 (2012) [2] J. Phys. Chem. C 114, 3588 (2010)

□ Piégeage de plusieurs atomes d'hydrogène

▷ Energie requise pour déplacer un atome dans la lacune [1-2]



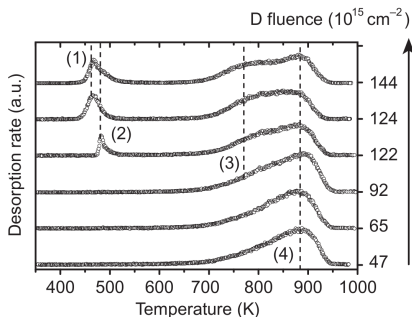
▷ Cinq atomes d'hydrogène piégés au maximum

▷ Configuration avec six atomes non favorable

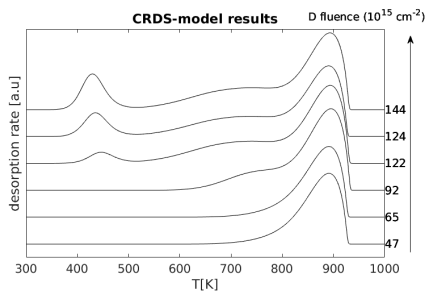
Nécessité de considérer le processus de multi-piégeage

[1] J. Phys. Chem. C 114, 3588 (2010) [2] J. Phys.: Condens. Matter 24, 095004 (2012)

- Modélisation CRDS : système d'équations de réaction et de diffusion couplées
- Comparaison spectres expérimentaux et modélisés



Spectre expérimental par Reinelt et al. [1]

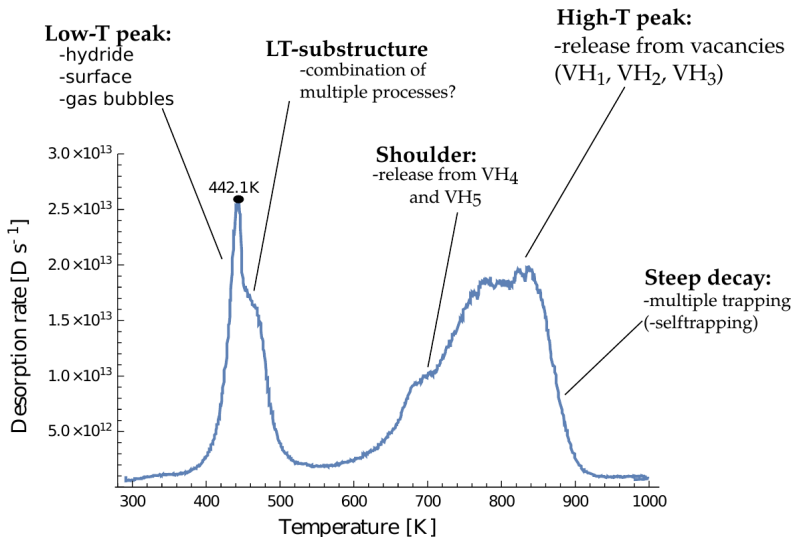


Résultats CRDS qualitatifs avec la même quantité de deutérium par D. Matveev et M. Wensing (IEK-4)

Accord acceptable avec l'expérience : plus qualitatif que quantitatif

[1] New Journal of Physics 11, 043023 (2009)

- Compréhension des phénomènes observés sur le spectre TDS [1]



[1] New Journal of Physics 11, 043023 (2009)

□ **Béryllium :**

- ▷ Modèle théorique établi et valide
- ▷ Mécanismes de diffusion des défauts clarifiés

□ **Système béryllium–hydrogène :**

- ▷ Etude de tous les sites possibles d'occupation
 - Sites les plus favorables déterminés
- ▷ Etude du multi-piégeage dans une lacune
 - Cinq atomes d'hydrogène au maximum
- ▷ Détermination du profil énergétique autour d'une lacune
 - Energies de diffusion, piégeage et de dépiégeage obtenues

□ **Lien avec les expériences : spectres TDS**

- ▷ Données utilisées pour modéliser les spectres TDS (IEK-4, Jülich)
- ▷ Multi-piégeage considéré dans le modèle

□ **Compréhension des mécanismes de diffusion, de rétention et de désorption**

Merci de votre attention