

Modélisation thermodynamique de O et H dans les alliages de Zr

Aymerick Puaux^{1,2}, Jean-Claude Crivello¹, Caroline Toffolon-Masclét², Maxime Dottor¹, Jean-Marc Joubert¹

¹ Université Paris Est, ICMPE (UMR 7182), CNRS, UPEC, F-94320 Thiais, France

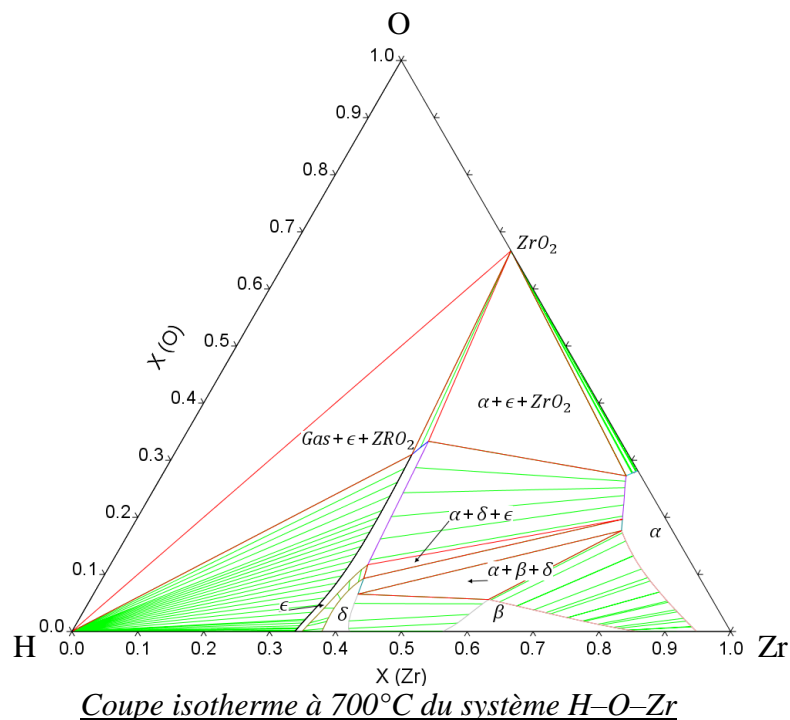
² DEN-SRMA, CEA, Université Paris-Saclay, F-91191 Gif-sur-Yvette, France

Résumé :

Les alliages de zirconium sont utilisés comme matériaux de gainage pour le combustible dans les réacteurs à eau pressurisée à 150 bars. Ces gaines sont exposées à un milieu radiatif et corrosif, et constituent la première barrière de confinement du combustible. Il est donc primordial qu'elles conservent leur intégrité pendant leur utilisation en conditions normales de fonctionnement (350°C) et/ou accidentelles (T>1000°C). Le développement d'outils permettant de prédire l'évolution des phases en fonction de la température et de la composition revêt donc un intérêt particulier.

Une première base de données thermodynamiques centrée sur les alliages de Zr et contenant les éléments Cr-Fe-Nb-Sn-Zr a déjà été développée [1]. Nous nous intéressons maintenant à l'ajout des éléments d'insertions H et O dans cette base de données. En effet, dans les conditions d'utilisation des gaines en réacteur, nous devons prendre en compte ces deux éléments compte tenu de leur effets sur les transformations de phases (formation d'hydrure, d'oxyde, etc.) et de leur effets sur la tenue mécanique des gaines (fragilisation de la microstructure).

Notre étude porte principalement sur les sous-systèmes H-O-Zr, Nb-O-Zr, H-Nb-Zr afin de décrire, dans un premier temps, le système quaternaire H-Nb-O-Zr. Pour ce faire, nous avons utilisé les données expérimentales disponibles dans la littérature, nos propres données expérimentales et des calculs DFT (Density Functional Theory). Les travaux expérimentaux se sont focalisés sur le système H-Nb-Zr.



[1] P. Lafaye, Développement d'outils de modélisation thermodynamique pour la prédiction de l'état métallurgique d'alliages à base de zirconium, Thèse doctorale UPEC, 2017.