



HAL
open science

Evolution de la structure du graphite sous irradiation émergence d'un nouveau scénario par simulation de dynamique moléculaire

L. van Brutzel, A. Chartier

► **To cite this version:**

L. van Brutzel, A. Chartier. Evolution de la structure du graphite sous irradiation émergence d'un nouveau scénario par simulation de dynamique moléculaire. 10ème Colloque 3M (Matériaux, Mécanique, Microstructure) - Matériaux en Conditions Extrêmes INSTN 2015, Jun 2015, Saclay, France. cea-02492548

HAL Id: cea-02492548

<https://cea.hal.science/cea-02492548v1>

Submitted on 27 Feb 2020

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Évolution de la structure du graphite sous irradiation : émergence d'un nouveau scénario par simulation de dynamique moléculaire

Laurent Van Brutzel, Alain Chartier

CEA, DEN, DPC, SCCME, F-91191 Gif-sur-Yvette Cedex, France

En tant que matériau utilisé comme modérateur dans les premières centrales nucléaires, le graphite et son évolution structurale sous irradiation ont été largement étudiés par le passé. Malgré ces nombreuses études, le détail des mécanismes qui conduisent à son amorphisation font encore débat et plusieurs scénarii sont disponibles [1,2,3]. A l'aide de simulations par dynamique moléculaire utilisant des potentiels empiriques, nous avons étudié la création de dommages pour un seul événement d'irradiation et les effets de dose jusqu'à l'amorphisation complète de la structure graphite. Pour se faire, deux méthodologies ont été utilisées : les cascades de déplacements pour l'étude de l'endommagement primaire et l'accumulation de défauts ponctuels pour l'évolution en fonction de la dose d'irradiation.

Nous montrons que le graphite ne s'amorphise pas par impact direct même pour des énergies de projectile (carbone) allant jusqu'à 40 keV. Seuls des défauts ponctuels de nature variée se stabilisent et restent après un évènement de cascade de déplacements. Cependant, l'amorphisation est atteinte par accumulation de ces défauts. Avant l'amorphisation, nous montrons que la structure du graphite évolue en trois étapes constituant un scénario alternatif à ceux déjà existants [4] :

1. augmentation du nombre de défauts ponctuels ;
2. un épinglage et un froissement des plans graphènes sur des petites poches amorphes ;
3. une amorphisation globale par percolation des poches amorphes.

Nous montrons également qu'il existe une corrélation entre les mécanismes microscopiques de ces trois étapes et le changement de dimension sur le réseau du graphite. Comme déjà montré par ailleurs, durant la première étape, les défauts interstitiels contribuent au gonflement le long de l'axe c tandis que les lacunes sont reliées au rétrécissement du plan basal. Par la suite, la contribution des défauts ponctuels est mineure et les évolutions structurales sont plutôt reliées aux ondulations des plans graphènes. Ce changement topologique est bien reproduit par une loi puissance qui lie le gonflement de l'axe c et le rétrécissement du plan basal à la dose d'irradiation.

Références

- [1] K. Niwase "Irradiation-induced amorphization of graphite: A dislocation accumulation model", *Phil. Mag. Lett.*, Vol 82, pp 401-408, 2002.
- [2] M.I. Heggie, I. Suarez-Martinez, C. Davidson, and G. Haffenden "Buckle, ruck and tuck: A proposed new model for the response of graphite to neutron irradiation", *J. Nucl. Mater.*, Vol 413, pp 150-155, 2011.
- [3] B.J. Marsden, and G.N. Hall, in "*Comprehensive Nuclear Materials*", chap. 4.11, pp 325, 2012.
- [4] A. Chartier, L. Van Brutzel, B. Pannier, and P. Baranek "Atomic scale mechanisms for the amorphisation of irradiated graphite", accepté dans *Carbon* 2015