



**HAL**  
open science

# Développement d'une nouvelle méthode Monte Carlo pour la simulation de l'altération des verres nucléaires à l'échelle atomique

Jean-Marc Delaye, Kamalesh Damodaran, Stephane Gin

► **To cite this version:**

Jean-Marc Delaye, Kamalesh Damodaran, Stephane Gin. Développement d'une nouvelle méthode Monte Carlo pour la simulation de l'altération des verres nucléaires à l'échelle atomique. Conférence internationale matériaux, Oct 2022, Lille, France. cea-04738824

**HAL Id: cea-04738824**

**<https://cea.hal.science/cea-04738824v1>**

Submitted on 15 Oct 2024

**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.

## Développement d'une nouvelle méthode Monte Carlo pour la simulation de l'altération des verres nucléaires à l'échelle atomique

Jean-Marc Delaye<sup>1</sup>, Kamalesh Damodaran<sup>1</sup>, Stéphane Gin<sup>1</sup>

<sup>1</sup> CEA, DES, ISEC, DE2D, SEVT, LCLT, Université de Montpellier, Marcoule, F-30207 Bagnols sur Cèze, France

### Résumé :

Les mécanismes élémentaires responsables des vitesses d'altération initiale et résiduelle des verres nucléaires simplifiés sont de mieux en mieux identifiés [1]. Il est dès lors possible d'envisager leur implémentation dans des approches de modélisation à l'échelle atomique de type Monte Carlo.

De tels algorithmes ont déjà été proposés par le passé [2]. Le principe consiste à représenter le verre et la solution à l'échelle atomique au moyen de nœuds répartis sur un réseau ordonné de type cristobalite. Un ensemble de probabilités régulent alors les fréquences de mise en solution des éléments du verre, et de redéposition à l'interface verre – solution des éléments peu solubles, ce qui permet de simuler la formation progressive du gel d'altération entre la solution et le verre sain. L'altération peut ainsi être ralentie voire stoppée.

Mais les premiers algorithmes Monte Carlo, trop simplistes, ne permettent pas de simuler une vitesse résiduelle d'altération non nulle une fois le gel stabilisé. C'est pourquoi une nouvelle approche a été développée. En simulant un sous-réseau pour le solide imbriqué avec un sous-réseau pour le liquide, et en complexifiant les mécanismes implémentés, il est aujourd'hui possible à la fois de simuler la formation du gel d'altération tout en garantissant l'atteinte d'une vitesse d'altération résiduelle non nulle.

Dans cette présentation, nous détaillerons les principes de cette nouvelle approche Monte Carlo et nous exposerons les premiers résultats obtenus par ajustement sur des expériences conduites sur des verres  $(1-x-y-z)\text{SiO}_2 \text{ xB}_2\text{O}_3\text{-yAl}_2\text{O}_3\text{-zNa}_2\text{O}$ .

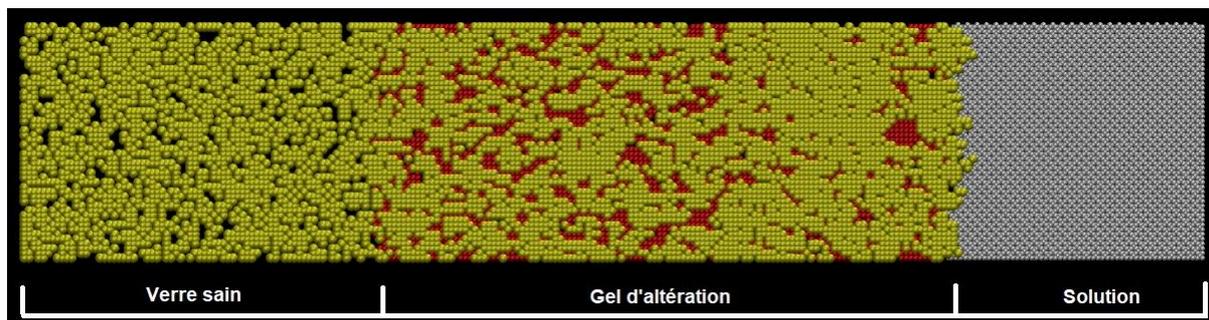


Figure 1 : Gel d'altération formé sur un verre de type  $\text{SiO}_2\text{-Al}_2\text{O}_3\text{-B}_2\text{O}_3\text{-Na}_2\text{O}$  après 800000 pas de simulation Monte Carlo. Si : jaune,  $\text{H}_2\text{O}$  de la solution initiale : gris,  $\text{H}_2\text{O}$  piégée dans le gel : rouge. Les autres éléments ne sont pas représentés pour ne pas surcharger la figure.

### Références :

- [1] S. Gin, J.-M. Delaye, F. Angeli, S. Schuller, NPJ Materials Degradation, 5, 1, 2021, 42.
- [2] A. Jan, J.-M. Delaye, S. Gin, S. Kerisit, Journal of Non-Crystalline Solids, 519, 2019, 6.