

Annnonce de séminaire INSTN

"Modélisation de la spéciation chimique d'un élément"
Lionel BION (CEA Saclay - INSTN/UEIN)

Vendredi 7 novembre 2008, de 9h30 à 11h00
CEA Saclay - INSTN, Bât. 399, salle B6

La spéciation chimique (connaissance de la distribution d'un élément en différentes espèces chimiques) est un domaine clef de compréhension des procédés et processus chimiques mis en œuvre dans le nucléaire (cycle du combustible actuel, réacteurs, environnement, toxicologie, gestion future des déchets).

La modélisation de la spéciation, qui permet de prévoir les formes chimiques sous lesquelles vont se trouver les éléments, est maintenant largement utilisée dans les laboratoires et dans l'industrie via l'essor de codes de calculs.

Cette modélisation s'appuie sur des concepts fondamentaux de physico-chimie des solutions ainsi que sur l'acquisition expérimentale d'un très grand nombre de données thermodynamiques chimiques. Après validation et mise en forme, ces données sont introduites dans des bases qui sont utilisées pour les calculs de spéciation (via des calculs analytiques ou des codes de calcul).

Cet exposé se propose de présenter les outils et méthodes intervenant dans cette modélisation :

- acquisition expérimentale et validation des données,
- analogie chimique,
- bases de données thermodynamiques,
- calculs analytiques et codes de calcul,
- exemples de calculs concernant la chimie des actinides, impacts du choix d'une donnée sur la modélisation de la spéciation.

L'exposé se terminera sur la présentation d'applications pédagogiques qui seront mis en œuvre à l'INSTN.

Illustrations :

Spéciation de l'uranium : quelques états chimiques de cet élément rencontrés dans le cycle du combustible (de haut en bas) : UO_2 (mine d'Oklo), "yellow cake" (concentration et purification du minerai), structure du composé UF_6 (utilisé dans l'enrichissement), UO_2 (pastille de combustible), structure du complexe uranium (VI) – nitrate - TBP (retraitement du combustible).

