

Simulations des propriétés physico-chimiques de verres sodoborosilicatés fondus à partir d'un champ de forces polarisable

F. Pacaud^{1,2}, M. Salanne¹, J.-M. Delaye²

¹ Sorbonne Université, UPMC Univ Paris 06, UMR 8234, PHENIX, F-75005 Paris, France.

² CEA, DEN, Laboratoire d'étude des Matériaux et Procédés Actifs, 30207 Bagnols-sur-Cèze

Les systèmes $\text{SiO}_2\text{-B}_2\text{O}_3\text{-Na}_2\text{O}$ (SBN) sont des composés ternaires à la base de nombreux verres notamment utilisés pour le confinement des déchets nucléaires en France (verre R7T7). La fonte de ces verres est une étape cruciale dans l'obtention des colis de verres. Il est donc important de connaître et maîtriser les propriétés telles que la conductivité électrique, la conductivité thermique ou encore la viscosité. Dans le but de caractériser ces propriétés dans l'état liquide nous avons réalisé une étude par dynamique moléculaire sur différentes compositions de verre $\text{SiO}_2\text{-B}_2\text{O}_3\text{-Na}_2\text{O}$. Ces simulations sont réalisées à partir d'un champ de forces polarisable (PIM) [1] développé au cours de ces travaux. Une étude structurale a notamment permis de mettre en évidence la spéciation du bore au cours de la trempe (passage d'une coordinence 3 à une coordinence 4 pour certains atomes de bore). La conductivité électrique (figure 1) ainsi que la viscosité ont également été calculées à haute température et montrent de bon résultats en comparaison avec l'expérience.

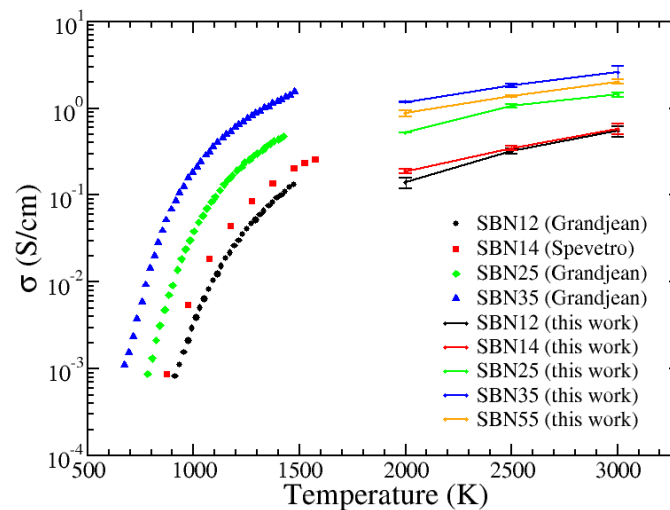


Figure 1 : Conductivité électrique expérimentale (plus basses températures) et simulée (plus hautes températures) des systèmes SBN étudiés en fonction de la température.

Ces études sont maintenant réalisées sur les mêmes systèmes auxquels sont ajoutés 3% mol. de La_2O_3 dans le but d'interpréter l'impact du lanthane sur les propriétés dynamiques précédemment étudiées.

[1] M. Salanne and P. Madden, *Molecular Physics*, 109:19, 2299-2315 (2011)