

La simulation des différentes étapes du cycle du combustible nucléaire, devrait aider à en diminuer le coût, en améliorer la maîtrise et la fiabilité, donner confiance en la gestion à long terme de ses déchets... Le DRCP (DEN Marcoule) organise les 14 et 15 février à Paris (ENSCP) un séminaire (soutenu par le CECAM) intitulé : Modélisation multi-échelle, applications aux procédés physico-chimiques. J'ai été sollicité pour présenter un exposé à la session : Problèmes spécifiques aux métaux lourds, lanthanides et actinides. Un des objectifs affichés par les organisateurs du séminaire est de dégager des sujets de recherche, bases possibles de partenariats avec nos collègues de la recherche académique. Je résume ainsi dans la conclusion de tels sujets :

#### Chimie quantique

- covalence dans des complexes d'éléments f
- réactivité en phase gazeuse d'ions f (pour la spectrométrie de masse)
- réactivité de ligands (complexants et extractants)
  - comprendre celle de ceux actuellement utilisés
  - qu'on souhaite améliorer (sélectivité, stabilité...)

Modélisation par dynamique moléculaire et gros grain  
Solvatation de complexes extraits (minerai d'uranium, retraitement),

(Aide à la) détermination de constantes d'équilibre (par dynamique moléculaire)  
système où on peut observer des échanges assez nombreux  
augmenter la durée des simulations  
idem à haute température  
Intégration thermodynamique (coordonnée de réaction adaptée)  
validation sur des systèmes connus

Influence de la température

Coefficients d'activité / complexation de surface.

Pierre Vitorge, Evry, le 11/02/2013