

COMMUNIQUE DE PRESSE



Paris, le 20 juin 2017

Cristallographie : quand un ordre inattendu émerge d'un matériau nanostructuré

Les pyrochlores sont des matériaux potentiellement utiles pour le confinement des déchets radioactifs ou pour les piles à combustibles. Dans *Nature Scientific report*, des chercheurs du CEA, du CNRS et leurs collègues australiens explorent l'organisation cristalline de ces matériaux pour mieux en connaître leurs caractéristiques mécaniques et leur stabilité sous irradiation.

Le pyrochlore ($\text{La}_2\text{Zr}_2\text{O}_7$) est un matériau modèle intéressant à la fois pour confiner des atomes radioactifs dans une matrice et pour faire circuler les protons dans une pile à combustible. Certains procédés de fabrication, notamment par chimie verte, conduisent à la formation de grains de dimension nanométrique et non plus micrométrique. Or ce pyrochlore « nanostructuré » présente des propriétés structurales et chimiques paradoxales.

Les oxydes complexes tels que le pyrochlore sont organisés en longs « rubans » de cubes et d'octaèdres. Ces formes géométriques résultent de l'affinité chimique respective des atomes de zirconium et de lanthane avec les atomes d'oxygène. Or lorsque le pyrochlore est produit, par exemple, par un procédé de chimie verte, les octaèdres semblent disparaître au profit des seuls cubes ! Ce constat surprenant s'appuie sur la diffraction d'électrons sur l'échantillon. L'utilisation de neutrons ou de rayons X conduit au même résultat...

La perplexité des chercheurs s'est renforcée au vu d'analyses complémentaires, chimiques cette fois.

Les modes de vibration des atomes, de même que les spectres par pertes d'énergie électronique, pointent tous deux vers une organisation classique du matériau, associant cubes et octaèdres.

À l'échelle microscopique de l'analyse chimique, les « gros » grains et les « petits » grains de pyrochlore sont indiscernables. À plus grande échelle, leurs structures semblent diverger... Les chercheurs ont donc eu l'idée de réduire le faisceau d'électrons à la dimension moyenne d'un « petit » grain pour leur analyse par diffraction. Tout est rentré dans l'ordre : ils ont retrouvé la structure classique, bien connue, du pyrochlore.

Que se passe-t-il à une échelle intermédiaire ? En fin de synthèse, les « petits » grains se regroupent de manière apparemment aléatoire, mais en réalité, ils obéissent à des lois physico-chimiques qui conduisent à un certain ordre. Un



Pyrochlore, matériau modèle intéressant tant pour les électrolytes de piles à combustible et pour le confinement d'atomes radioactifs.

Photo : wikicommons/ Locality: Mt Malosa, Zomba District, Malawi - Picture width 4 mm. Collection and photograph Christian Rewitzer

« gros » grain contient environ cinq « petits » grains dont l'assemblage possède une certaine forme d'ordre. Il en résulte que la diffraction d'électrons sur cet objet est perturbée par des interférences destructives. Cet artefact donne alors l'illusion d'une structure composée seulement de cubes.

Cette étude permettrait d'expliquer les observations réalisées sur d'autres oxydes soumis à des effets d'irradiation, tels les spinelles (1). Elle souligne par ailleurs l'importance de l'échelle mésoscopique (échelle intermédiaire entre celle des atomes et celle du matériau) dans les simulations du comportement des matériaux sous irradiation.

Les chercheurs comptent désormais approfondir leur compréhension du comportement sous irradiation d'autres matériaux comme le dioxyde d'uranium.

Référence : ***Intricate disorder in defect fluorite/pyrochlore: a concord of chemistry and crystallography***, David Simeone, Gordon James Thorogood, Da Huo, Laurence Luneville, Gianguido Baldinozzi, Vaclav Petricek, Florence Porcher, Joel Ribis, Leo Mazerolles, Ludovic Largeau, Jean Francois Berar, Suzy Surble, Nature Scientific report

(1) Les spinelles sont des oxydes couramment utilisés dans l'industrie nucléaire.

Contact Presse

François Legrand – francois.legrand@cea.fr - 01 64 50 20 11