

Sujet : Étude de l'effet du zirconium sur la vaporisation et la dégradation des crayons en AIC en conditions accidentelles sévères

Thématiques : chimie ; physique

Mots clés : Ag-In-Zr-O, thermodynamique, accident grave

Laboratoire IRSN : Laboratoire d'étude du corium et du transfert des radioéléments (LETR) – Cadarache (13) et IM2NP – Marseille (13)

Description : Le sujet de thèse proposé consiste tout d'abord à acquérir par l'expérience et/ou par le calcul *ab-initio* (sur la base de la Théorie de la Fonctionnelle de la Densité, DFT), les données nécessaires à la description thermodynamique des phases dans les sous-systèmes binaires In-Zr et $\text{In}_2\text{O}_3\text{-ZrO}_2$ encore incomplets et dans le système ternaire Ag-In-Zr. Ce projet s'appuiera sur l'ensemble des compétences et des moyens expérimentaux dont disposent les laboratoires Symme (Annecy), IM2NP (Marseille), JRC (Karlsruhe), Simap (Grenoble) et SAG/LETR & LEPC (Cadarache (13)). Les travaux expérimentaux concerneront plus particulièrement, l'analyse thermique différentielle (ATD) à haute température (> 2000 °C) pour la détermination des températures des transformations invariantes et des courbes de liquidus, les mesures de calorimétries en réaction directe ou par dissolution et différentielle à balayage (DSC) pour la production de grandeurs thermodynamiques (telles que les enthalpies de formation, les capacités thermique), la diffraction des rayons X (DRX) pour l'identification des phases et la détermination de structures cristallines, la microscopie électronique à balayage (MEB) pour l'identification des phases et de leur type de formation, et enfin la modélisation thermodynamique, dans la continuité de la collaboration avec le laboratoire Simap sur la base Nuclea. Dans une seconde étape, un modèle permettant de décrire la coulée des matériaux hors du crayon de contrôle sera développé. L'établissement des équations de conservation de la quantité de mouvement des mélanges et de leur l'énergie sera le point de départ du développement à entreprendre. Il devra intégrer les phénomènes de solidification en cours de coulée. Dans un souci de simplification, on considèrera le cas limite d'une coulée sans dépôt solide sur les structures, c'est-à-dire d'un mélange liquide-solide avec prise en compte d'une viscosité effective traduisant la présence de cristaux solides dans la coulée.

Compétences et diplôme demandés : M2 Recherche Physique-Chime. Âge limite : 26 ans sauf dérogation.

Tuteur : Marc BARRACHIN

Contact : Transmettre CV + lettre de candidature + relevés de notes M1 et M2 à Marc BARRACHIN, 04 42 19 94 14, marc.barrachin@irsn.fr