

Sujet : Étude des équilibres de phases dans le système ternaire Cr-Zr-O pour la détermination de la marge à la fusion de combustible de type ATF

Thématiques : chimie ; physique

Mots clés : Zr-Cr-O, thermodynamique, ATF

Laboratoire IRSN : Laboratoire d'étude du corium et du transfert des radioéléments (LETR) – Cadarache (13) et Symme – Annecy (74)

Description : Cette étude vise à examiner en détail les équilibres de phase solide-liquide des alliages Zr-Cr et Zr-Cr-O. Pour le diagramme binaire, quelques études sont disponibles mais souvent en désaccord notamment dans la partie du système riche en zirconium pour la détermination des températures de liquidus. Les données expérimentales disponibles sur le système ternaire Cr-O-Zr dans la partie métal-oxyde sont beaucoup plus limitées. Seuls Rhee et al. présentent trois sections isothermes expérimentales à 1473 K, à 1773 K et à 1973 K avec l'existence d'un composé ternaire de stœchiométrie Zr_3Cr_3O pour lequel il n'existe pas de données thermodynamiques. Ces sections ont été construites à partir de mesures réalisées dans des creusets en tungstène pour lesquels il est aujourd'hui avéré que l'interaction avec le zirconium est inévitable.

Le sujet de thèse proposé consiste 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 équilibres à hautes températures qui implique la phase liquide dans les systèmes Cr-Zr et Cr-Zr-O. 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 (Cadarache (13)). Le projet proposé bénéficiera de l'expérience acquise en matière de mesures sur les systèmes à base zirconium des travaux de thèse d'A. Decreton et de K. Gajavalli. La capitalisation des résultats sera effectuée dans la base de thermodynamique Nuclea développée à l'IRSN. Elle permettra également de faire les premières estimations de l'interaction entre la gaine et le combustible sur la base de calculs thermodynamiques. Les travaux expérimentaux concerneront 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) pour les composés Cr_2Zr et Zr_3Cr_3O , la diffraction des rayons X (DRX) pour 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.

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

Tuteur : Marc BARRACHIN

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