

# Doctorant (H/F) en physico chimie des matériaux

Date Limite Candidature : vendredi 25 juin 2021

URL Courte : <https://bit.ly/3w37wxK>

## Informations générales

Référence : UPR3079-MARBAR1-002

Lieu de travail : ORLEANS

Date de publication : vendredi 4 juin 2021

Nom du responsable scientifique : Marie-France Barthe

Type de contrat : CDD Doctorant/Contrat doctoral

Durée du contrat : 36 mois

Date de début de la thèse : 1 octobre 2021

Quotité de travail : Temps complet

Rémunération : 2 135,00 € brut mensuel

## Description du sujet de thèse

Titre : Combinaison de techniques expérimentales pour caractériser le dommage primaire dans des alliages modèles d'intérêt pour l'énergie nucléaire.

La recherche sur les matériaux pour le nucléaire, à la fois pour le développement de nouveaux réacteurs ou pour faire évoluer les conditions de fonctionnement et prolonger l'usage de ceux qui sont opérationnels aujourd'hui, implique de prévoir leur comportement en service. En effet, les matériaux dans les réacteurs sont soumis à des conditions extrêmes d'usage et en particulier aux irradiations avec des neutrons qui génèrent des déplacements atomiques à l'origine de la formation de défauts ponctuels et étendus (clusters de défauts ponctuels) dans la matière. Ces premiers stades de modification des matériaux sont déterminants dans l'évolution ultérieure de leur microstructure, leur vieillissement en condition de service, et la modification de leurs propriétés mécaniques. Il est donc essentiel de mieux comprendre les mécanismes de création de l'endommagement généré par irradiation. Cela implique le développement conjoint de techniques de modélisation et expérimentales de caractérisation de la microstructure. Cette thèse s'inscrit dans le développement des techniques de caractérisation pour une meilleure description du dommage primaire et de son évolution et en particulier, pour valider les distributions de défauts obtenus par les calculs en dynamique moléculaire (DM) de cascades de déplacements qui sont utilisés comme termes source dans l'approche de modélisations multi-échelle de l'endommagement induit par irradiation.

Dans l'état actuel des outils expérimentaux disponibles, il est impossible de caractériser directement le dommage primaire induit par une cascade de déplacements. Nous proposons une nouvelle approche pour déterminer ce dommage primaire. Celle-ci repose sur la comparaison des microstructures obtenues par modélisations atomistiques d'une part et des expériences (irradiation et caractérisation) d'autre part, les deux partageant au maximum les mêmes conditions d'endommagement (dpa, dpa/sec, température). Il est à noter que la précision de ce type d'approche a récemment été améliorée de façon significative car il est aujourd'hui possible de simuler des données expérimentales (spectroscopies Raman et de positons, microscopie électronique, diffraction de rayons X ou d'électrons...) réalistes à partir de calculs atomistiques.

L'objectif de cette thèse est donc de décrire précisément le dommage primaire. Ceci nécessitera, dans un premier temps, de dresser une cartographie fine des sensibilités et domaines de complémentarité de plusieurs techniques de caractérisation expérimentales, travail de fond qui n'a encore jamais été mené ; pour cela, nous explorerons une vaste gamme de conditions d'endommagement vastes, en termes de niveau et de nature du désordre. Plusieurs techniques seront mises en œuvre, permettant de sonder de nombreux types de défauts à différentes échelles, à la fois en taille des défauts eux-mêmes mais aussi de la zone sondée plus ou moins locale : la mesure de résistivité (RR) – sensible à un large panel de défauts et mise en œuvre à basse température, ce qui limite l'évolution du dégât primaire -, la spectroscopie d'annihilation de positons (PAS) - plus spécifique à la détection de petits défauts lacunaires -, la spectrométrie de rétrodiffusion Rutherford en canalisation (RBS/C) – idéale pour détecter les défauts interstitiels, la diffraction/diffusion des rayons X (DRX) – adaptées à la plupart des irrégularités du cristal et enfin la microscopie électronique en transmission (MET) - plutôt optimisée pour les plus gros défauts sur des échelles très locales. Par ailleurs, nous envisageons une remontée en compétences sur des techniques de diffusion diffuse (telle que la diffusion Huang), pour sonder les distributions en taille des clusters. Dans un second temps, l'identification et la description à proprement dites du dommage primaire seront réalisées en suivant deux voies complémentaires. D'une part, nous procéderons à des irradiations dans des conditions qui permettront de limiter l'évolution microstructurale (très faibles doses d'endommagement) et nous mettrons en œuvre les techniques adaptées (et identifiées lors de la première partie du travail) pour la caractériser. D'autre part, nous caractériserons finement les microstructures induites sur une plus large gamme de niveau de désordre et nous remonterons au dommage primaire à l'origine de ces microstructures complexes, en nous appuyant sur des modélisations atomistiques. Afin de limiter le nombre de paramètres expérimentaux, nous privilégierons des matériaux purs, tels que Ni, Fe et des alliages de structure cfc. Ces travaux ouvriront la voie à l'étude de matériaux plus complexes comme les aciers austénitiques industriels 316 et 15/15Ti utilisés ou envisagés dans les réacteurs.

Le ou la doctorant(e) participera aux tests des dispositifs de RR et de PAS, à leur couplage ainsi qu'au couplage avec la RBS/C et la DRX. Il ou elle contribuera également à l'interprétation des données expérimentales via les résultats de modélisation.

## Contexte de travail

Au CNRS, à Orléans, le CEMHTI est une unité propre de recherche du CNRS répartie sur deux sites proches (Haute température et Cyclotron) et regroupant environ 110 personnes.

Le laboratoire développe des expertises et des outils originaux sur le plan national et international pour étudier notamment in situ les propriétés physico-chimiques des matériaux en conditions extrêmes. Il dispose d'une plateforme « faisceaux de particules » qui gère et développe des accélérateurs pour irradier (Pelletron) et caractériser les matériaux (accélérateurs de positons lents). D'autres moyens de caractérisation sont aussi accessibles sur le campus d'Orléans comme le microscope électronique à balayage ou à transmission (plateforme MACLE).

La thèse doctorale sera menée au CEMHTI (Conditions Extrêmes pour les Matériaux : Haute Température et Irradiations, <https://www.cemhti.cnrs-orleans.fr>) à Orléans en collaboration avec les laboratoires IJCLab à Orsay et IRCER à Limoges. Le/la doctorant/te rejoindra l'équipe « Défauts, Impuretés, Radiotraceurs : Propriétés, Matériaux, Imagerie (DEFIR) » basée sur le site cyclotron et sera rattaché(e) au thème « Propriétés des défauts : Matériaux nucléaires et TIC ». Il/elle effectuera des campagnes d'expériences dans les laboratoires IJCLab et IRCER.

Le Laboratoire de Physique des 2 Infinis Irène Joliot-Curie, ou IJCLab, est une Unité Mixte de Recherche du CNRS, de l'Université Paris Saclay et de l'Université de Paris, située sur le campus de la Faculté des Sciences d'Orsay (<https://www.ijclab.in2p3.fr/>). Parmi les thèmes scientifiques développés dans ce laboratoire, le Pôle Energie & Environnement traite tout particulièrement des problématiques liées aux matériaux pour l'énergie nucléaire, et notamment celles liées à leur comportement sous irradiation. Pour cela, le Pôle dispose d'un accès à une plateforme d'accélérateurs d'ions couplés à un microscope électronique en transmission. Outre l'irradiation des matériaux, ces accélérateurs permettent de mettre œuvre des techniques de caractérisation par faisceaux d'ions, dont la RBS/C pour laquelle le Pôle possède une grande expertise et des codes de modélisation ad hoc. L'IRCER, Institut de Recherche sur les Céramiques (<https://www.ircer.fr/>), travaille depuis plus de 10 ans en étroite collaboration avec IJCLab sur la caractérisation de l'endommagement dans les matériaux induits par irradiation, notamment en s'appuyant sur l'expertise de l'IRCER en termes de cristallographie, diffraction/diffusion des rayons X et simulations numériques des signaux. L'IRCER dispose de plusieurs diffractomètres haute résolution, capables de fonctionner sous différentes conditions (température, atmosphère) et pour différents types de matériaux (monocristaux, couches minces, polycristaux, etc.). La thèse sera dirigée par Marie-France Barthe (CEMHTI-Orléans) et Aurélien Debelle (IJCLab-Orsay) et bénéficiera également de l'encadrement d'Alexandre Boulle (IRCER-Limoges) et de Pierre Desgardin (CEMHTI-Orléans).

## Contraintes et risques

L'activité liée au profil de poste nécessitera des déplacements professionnels durant les 3 années de la thèse. Travail sous rayonnement ionisants : une formation sur la radioprotection sera dispensée en interne.

Date limite de réception des candidatures fixée au 25 juin 2020.

### **Informations complémentaires**

Le/La candidat(e) devra être titulaire d'un diplôme d'ingénieur et/ou d'un master couvrant un large panel des thématiques reliées à la physico-chimie des matériaux. Le poste nécessite en effet de solides connaissances en matériaux (métaux, propriétés des défauts, structure électronique et cristallographique), mais aussi en techniques de caractérisation associées (microscopies, DRX, analyse par faisceau d'ions). Des connaissances dans le domaine des interactions ion/matière seraient appréciées. Une maîtrise ou une volonté d'acquérir les compétences en outils numériques pour l'analyse de données est vivement souhaitée. Un goût prononcé pour la science expérimentale est nécessaire. De bonnes aptitudes à la communication orale et écrite (anglais nécessaire et français souhaité) pour présenter ses travaux en congrès et rédiger des articles dans des revues scientifiques sont requises. Enfin, nous recherchons un(e) jeune chercheur(e) curieux(se), ayant une certaine autonomie et qui saura s'impliquer dans son projet de recherche.

Les candidatures devront inclure dans leur dossier de candidature :

- un CV détaillé
- au moins deux références (personnes susceptibles d'être contactées)
- une lettre de motivation adaptée au sujet d'une page
- un résumé d'une page du mémoire de master
- les notes et classement de Master 1 et 2 ou d'école d'ingénieur.