

## Modélisation multi-échelle de la précipitation dans les combustibles nucléaires

### Domaines de spécialité :

Physique des matériaux

### Contexte :

La durée de vie des combustibles nucléaires est limitée par les gaz issus des réactions de fission. Le stage contribuera à comprendre le comportement de ces gaz (migration, précipitation) durant l'irradiation, au moyen d'un modèle construit sur une démarche multi-échelle [1] intégrant des données de base calculées par méthodes atomistiques [2,3]. Ce sujet présente l'intérêt d'articuler une dimension "interprétation" et une dimension "théorique" (amélioration du modèle). Selon les résultats et ses centres d'intérêt, le stagiaire pourra mettre l'accent sur l'un ou l'autre de ces aspects. Ce stage offre ainsi la possibilité au candidat motivé de participer à une démarche de modélisation multi-échelle et d'éprouver par lui-même en quoi des outils de simulation basés sur les données microscopiques les plus fondamentales contribuent à traiter et expliquer des situations pratiques.

1. Skorek, R. (2013). Étude par Dynamique d'Amas de l'influence des défauts d'irradiation sur la migration des gaz de fission dans le dioxyde d'uranium (PhD Thesis). Univ. Aix-Marseille.
2. Andersson D. et al. (2014). Atomistic modeling of intrinsic and radiation-enhanced fission gas (Xe) diffusion in UO<sub>2</sub>+/-x: Implications for nuclear fuel performance modeling. Journal of Nuclear Materials, 451, 225–242.
3. Le Prioux A. et al. (2016). Empirical potential simulations of interstitial dislocation loops in uranium dioxide. Journal of Nuclear Materials, 479, 576–584.

### Objectifs :

- Interpréter au moyen d'un code de simulation des expériences de recuit et d'annihilation de positions sur des échantillons de combustible nucléaire implanté aux ions.
- Améliorer la méthode permettant d'ajuster les paramètres encore inconnus sur les expériences
- Etudier la sensibilité des grandeurs mesurées aux paramètres du modèle et prioriser les actions visant à les évaluer

### Étapes du stage :

- sélection des expériences les plus pertinentes pour construire une base de données de validation
- simulation des expériences sélectionnées
- analyse critique des résultats
- amélioration du jeu de paramètres par ajustement sur une partie des données expérimentales
- amélioration de la procédure d'ajustement par l'utilisation d'une bibliothèque d'algorithmes d'optimisation

### Moyens de calculs, informatiques mis en œuvre (langages, logiciels) :

Code de simulation en FORTRAN90, Mathematica, unix, progiciel d'optimisation URANIE

### Mots clés :

Modél cinétique, simulation, interprétation d'expériences, optimisation

### Durée :

6 mois

### Lieu :

CEA Cadarache (13)

### Formation souhaitée

École d'ingénieur, M1 ou M2 en physique des matériaux ou physique du solide  
Compétences et goût pour les développements informatiques ET pour le travail d'interprétation physique.

Possibilité de poursuivre en thèse Oui :

Non :

### Responsable/contact

Nom : MAILLARD Prénom : Serge Email : serge.maillard@cea.fr

Candidature à adresser 3 mois avant le début du stage au responsable Consultation des stages CEA sur le site Internet: <http://portail.cea.fr/emploi>