

**Offre de post-doctorat (thermochimie, chimie quantique)
Réactivité des produits de fission en conditions d'accident grave**

Niveau :	Thèse en matériaux et modélisation moléculaire, connaissances en thermochimie
Lieu et durée :	Lille, 2 ans
Date de disponibilité :	Janvier 2016
Montant de la bourse	~2100 euros nets / mois

Contexte

Lors d'un accident dans une installation nucléaire, les radionucléides issus de la fission du combustible sont susceptibles d'être relâchés à l'environnement. A ce titre, l'iode et le ruthénium sont des produits de fission particulièrement importants car ils contribuent fortement aux conséquences radiologiques. Dans le cadre de l'appel à projets "Recherche en matière de sûreté nucléaire et de radioprotection" (RSNR), le projet MiRE (Mitigation des Rejets à l'Environnement) a été sélectionnéⁱ. Ce post-doctorat s'inscrit dans le projet MiRE d'une durée de 6 ans (2013-2019). Un des objectifs du programme MIRE est de mieux comprendre le comportement de l'iode et du ruthénium en conditions accidentelles.

L'iode peut être présent dans l'enclume de confinement sous forme soit gazeuse soit particulaire.

Les oxydes d'iode sont formés par l'oxydation des iodures organiques et de l'iode moléculaire. La composition chimique des oxydes d'iode reste à établir en conditions accidentelles.

Concernant le ruthénium, après avoir été relâché du combustible fondu, il se dépose principalement sous forme RuO₂ avec une possible revolatilisation sous forme RuO₃ ou RuO₄.

Sujet

Le travail consiste :

- A partir des données existantes dans la littérature, il faudra compiler et faire une analyse critique des données thermodynamiques relatives aux composés I_xO_yN_z (oxydes et nitrosiles d'iode).
- A réaliser des simulations à l'équilibre thermodynamique pour déterminer les espèces stables et leurs phases, en conditions représentatives d'un accident grave ;
- A faire une analyse de sensibilité pour établir le cas échéant si les incertitudes associées aux données thermodynamiques nécessitent ou non d'être réduites ;
- S'il y a un impact important de ces incertitudes, à faire des calculs de chimie théorique pour déterminer/confirmer les données thermodynamiques.
- A faire les mêmes calculs de composition avec une approche, hors équilibre, en tenant compte de cinétiques de réactions existantes.

Lors de la seconde année, une étude cinétique portant sur la réaction entre les dépôts de ruthénium sous forme oxyde et le dioxyde carbone, RuO₂(cond) + CO₂ → RuO₃(g) + CO, sera conduite.

Cette étude sera faite par chimie quantique afin de déterminer la constante de vitesse. Des extrapolations seront ensuite réalisées pour estimer l'impact de cette réaction sur les rejets potentiels en cas d'accident.

Collaborations

Le post-doctorat aura comme interlocuteur deux laboratoires :

- le LETR (<http://www.irsn.fr/FR/Larecherche/Organisation/equipes/surete-nucleaire/LETR/>), situé sur le centre nucléaire de Cadarache. Ce laboratoire fait partie de l'IRSN (Institut de Radioprotection et de Sûreté Nucléaire) expert public des risques nucléaires.
- le PC2A (<http://pc2a.univ-lille1.fr/>) est une unité de recherche associée au CNRS (UMR 8522) et à l'Université de Lille 1.

Contacts

Pour plus de renseignements :

- Florent Louis (florent.louis@univ-lille1.fr), tél : 03.20.33.63.32
- Laurent Cantrel (laurent.cantrel@irsn.fr), tél : 04.42.19.94.50

Merci d'envoyer un CV + une lettre de motivation.

ⁱ (<http://investissement-avenir.gouvernement.fr/sites/default/files/user/20130517%20CP%20RSNR.pdf>)