



Postdoctorat

Titre : Simulation thermodynamique et cinétique des transformations de phase par la méthode CALPHAD

Sujet :

Le plutonium est sans doute un des éléments dont la métallurgie est la plus complexe puisqu'il possède six variétés allotropiques. Une d'entre elles, la phase δ , est plus ductile et moins oxydable que la phase α . Cette phase peut être stabilisée à température ambiante grâce à l'addition d'éléments comme l'aluminium, le gallium, le cérium ou encore l'américium. Sous l'effet des basses températures ou d'une élévation de pression, ces alliages δ métastables subissent différents types de transformations via différents chemins thermodynamiques (directs ou partiellement indirects avec des phénomènes associés telle la diffusion du soluté). Dans ce contexte, il apparaît opportun de pouvoir simuler ce comportement et d'identifier les phénomènes mis en jeu.

Dans ce but, le CEA Valduc a réalisé des expériences par diffraction des rayons X (DRX), dilatométrie, calorimétrie (DSC), microsonde de Castaing, et microscopie électronique à balayage (MEB) afin de caractériser, analyser et comprendre les transformations de phase. En parallèle à ces études expérimentales poussées, le CEA Valduc a initié une étude de simulation thermodynamique et cinétique des transformations de phase par la méthode CALPHAD (CALculation of PHase Diagrams) afin de comprendre les processus mis en jeu d'un point de vue théorique, puis de prédire les transformations impliquées en fonction de la température, des contraintes extérieures et de la composition chimique des alliages. Cette étude numérique, basée sur l'utilisation du logiciel Thermo-Calc couplé au module cinétique DICTRA (Diffusion Controlled TRANSformations), repose sur le développement et l'optimisation de la description des volumes au sein des bases de données existantes.

Il sera ainsi demandé au postdoctorant en charge de cette étude de :

- se former à l'implémentation de la description des volumes au sein des bases de données thermodynamiques utilisées par le logiciel Thermo-Calc et le module DICTRA permettant la modélisation des transformations de phase. Sur ce point, la maîtrise des optimisations de type CALPHAD est indispensable;
- collaborer étroitement avec les expérimentateurs afin de proposer les expériences nécessaires pour alimenter les optimisations des bases de données ;
- participer à la mise en place et au suivi de collaborations avec des acteurs reconnus dans le domaine CALPHAD ;
- synthétiser et de publier les résultats obtenus sous formes de différents documents et de publications dans des journaux internationaux ou communications en congrès.

Le service dans lequel est situé le laboratoire est un service de recherche, dédié à la métallurgie et aux analyses de surface. Il dispose de nombreux moyens expérimentaux nucléarisés qui permettront au candidat d'approfondir ses connaissances sur les matériaux métalliques. Enfin, l'intégration du candidat au sein d'une équipe d'ingénieurs et de techniciens jeunes lui permettra d'enrichir son expérience et d'acquérir les bases pour gérer une équipe dans la suite de sa carrière.

Durée du contrat : 12 mois (renouvelable 1 fois)

Nom et coordonnées des responsables scientifiques :

Benoît Oudot, Tél : 03.80.23.47.22, benoit.oudot@cea.fr

Service Ressources Humaines et dialogue Social

Sophie Bohar, Sophie.bohar@cea.fr