



PEPR Science Amont Nucléaire de Fission (SCIAM)

Projet 2 : données thermophysiques et thermochimiques pour le corium

Nicolas Dacheux (CNRS, Univ Montpellier)

Johann Bouchet (CEA/IRENE) – Michel Schlegel (CEA/ISAS)

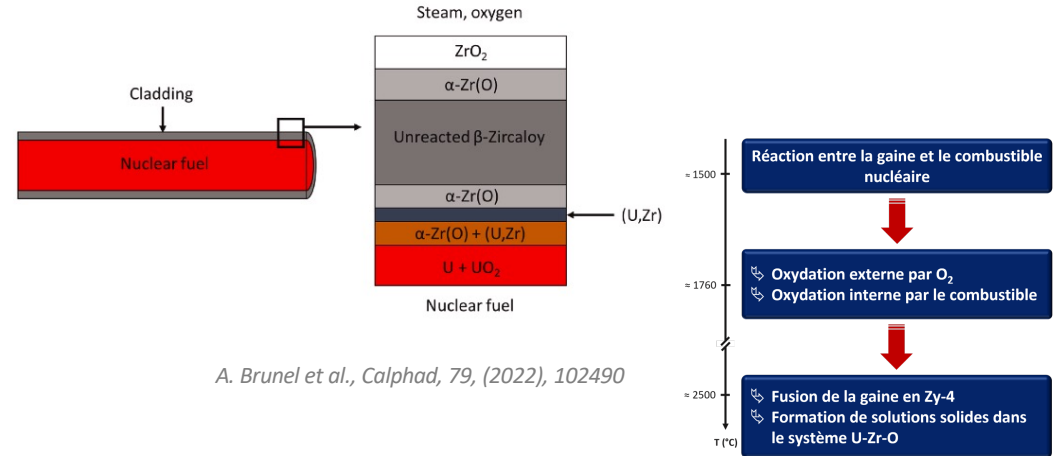
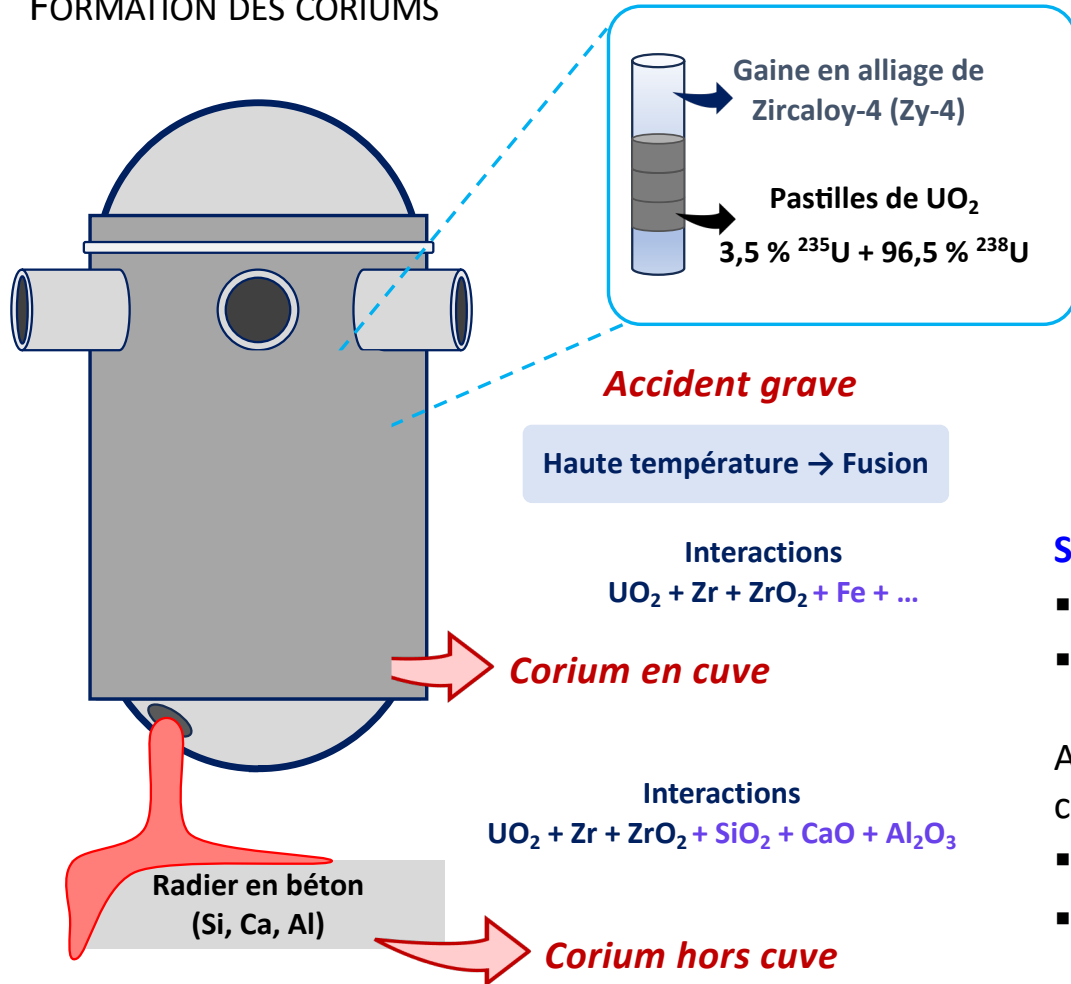


Journée de lancement – 04 Septembre 2026 - IJCLab



Contexte et enjeux scientifiques

FORMATION DES CORIUMS



Systèmes chimiques complexes et multi-élémentaires :

- Données souvent difficiles à acquérir
- Bases de données nécessaires incomplètes

Acquisition de **données de base essentielles** pour comprendre ces systèmes complexes :

- Lors de leur **formation** (WP1)
- Lors de leur **refroidissement** par aspersion d'eau (WP2)

Description des actions / Besoins

Systèmes d'étude : U-Zr, U-Zr-O, U-Zr-O (+PF), U-Fe-O, UO₂-Zr-ZrO₂-Fe, UO₂-ZrO₂-SiO₂, UO₂-ZrO₂-SiO₂ (+PF)

WP1

- **Préparation** de matériaux : phases individuelles $\Rightarrow$ Assemblages $\Rightarrow$ Coriums reconstitués
- Acquisition de **données thermodynamiques et thermophysiques** :
 - Données thermodynamiques (C_p , ΔH , ΔS , ΔG) par calorimétrie, banc de lévitation, solubilité
 - Températures de liquidus, solidus ou valeurs de densités des phases liquides par chauffage laser
 - Masses volumiques, tensions de surface, viscosités par lévitation aérodynamique
- **Modélisations thermodynamiques** $\Rightarrow$ Construction/modification des **diagrammes de phases**



- Compréhension des **mécanismes de lixiviation** en conditions de refroidissement (présence d'eau)
- Lixiviation des matériaux préparés dans le WP1 (approche duale) :
- **Approche macroscopique** (étude multiparamétrique)
 - Vitesses de dissolution (phases pures, assemblages) et données de solubilité
 - Détermination des termes sources (coriums prototypes) $\Leftrightarrow$ Comparaison avec les phases pures
- **Approche microscopique**
 - Suivi *operando* des interfaces solide/liquide en évolution
 - Identification / Caractérisation des phases secondaires néoformées $\Leftrightarrow$ Impact sur les inventaires en solution
 - Proposition de mécanismes de lixiviation des coriums

WP2

Structuration dans NEEDS : projets ZIRON, SOMC2, FEOZ

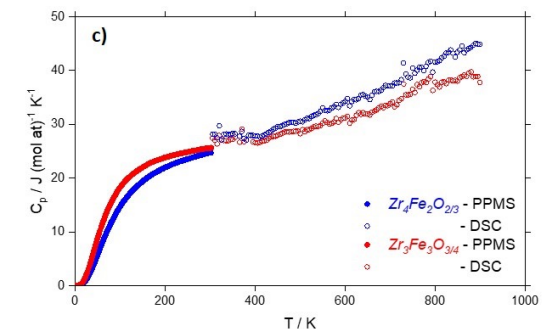
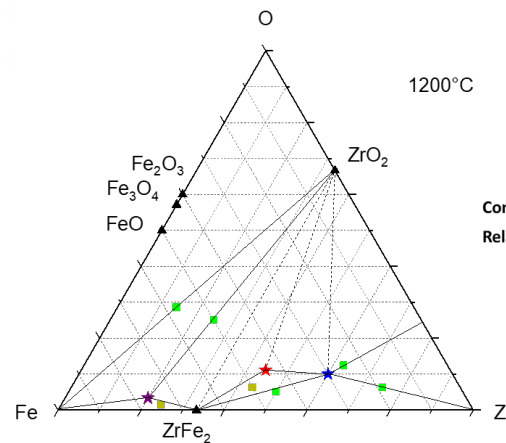
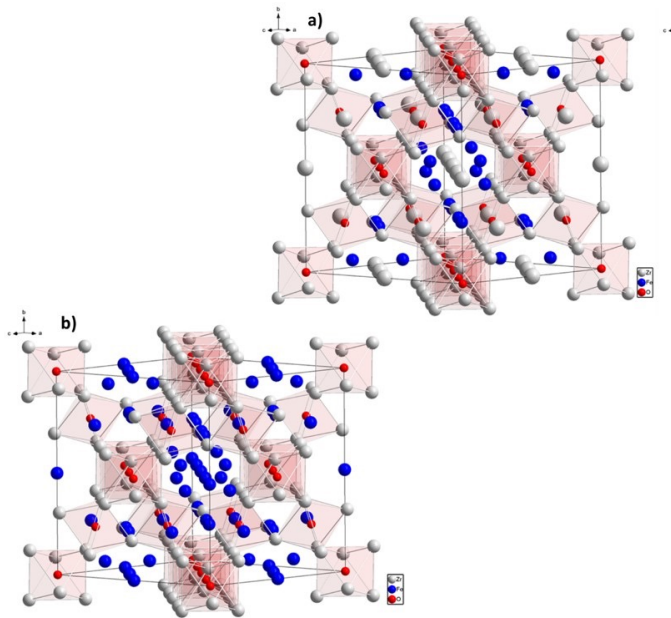
Collaboration CNRS (UMET, IM2NP, UCCS) / ASNR / CEA (ISAS) / [Thèse CNRS Hugo Desmarchelier \(2022-2026\)](#)

- Développement des connaissances expérimentales et amélioration des modèles thermodynamiques sur le corium ($\text{UO}_2 + \text{Zr} + \text{ZrO}_2 + \text{Fe}$)
- Etude des sous-systèmes Zr-Fe-O et Fe-Zr

Etude structurale $\Rightarrow$ Nouvelles structures

Mesures de capacités calorifiques entre 2 et 900 K pour les composés ternaires $\text{Zr}_4\text{Fe}_2\text{O}_{0,67}$ et $\text{Zr}_3\text{Fe}_3\text{O}_{0,75}$

Relations de phases dans la partie « métallique » du système Fe-O-Zr (1200°C)



Structuration dans NEEDS : projet PROTECT

PROpriétés **Th**ermophysiques du **Co**rium en **T**empérature

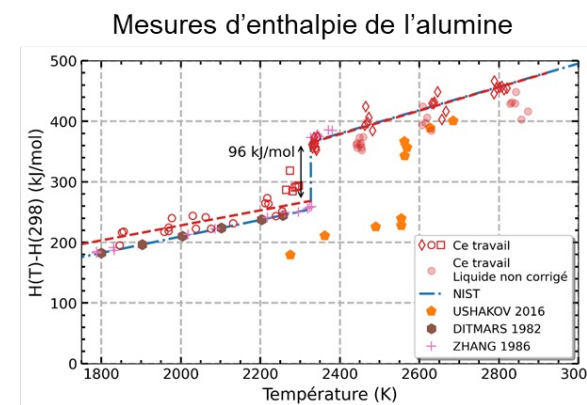
Collaboration CNRS (CEMHTI, SIMAP) / CEA (IRESNE)

- Mesure de la capacité calorifique des liquides (CEMHTI) / **Thèse CNRS Adrien Crochetet (2022-2026)**
 - Développement d'un banc de mesure d'enthalpie
- Mesures de conductivité thermique (SIMAP)
- Modélisation par dynamique moléculaire et prédiction des propriétés (capacité, viscosité, densité)



Calorimètre à chute

Mesures de la capacité
calorifique des liquides



Gamme température dans la littérature

Extension de la gamme aux hautes températures (2400 – 2800 K)

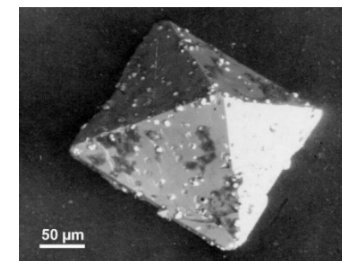
Structuration dans NEEDS : projet EPIC

Etude de Phases d'Intérêt pour le Corium

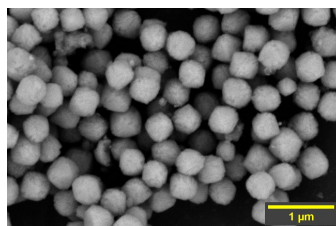
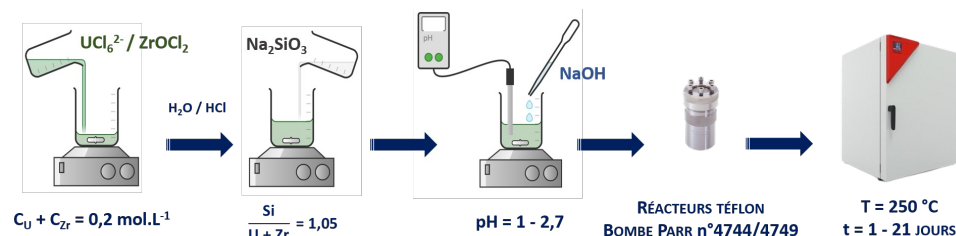
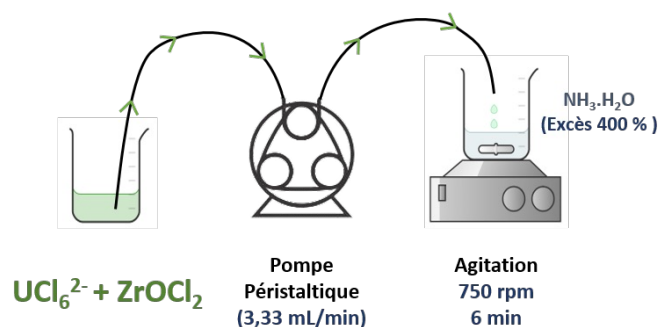
Collaboration CNRS (ICSM) / CEA (ISAS) $\Rightarrow$ Thèse CEA Arthur Avallone (2024-2027)

Collaboration internationale : ESRF/ROBL, Washington State University

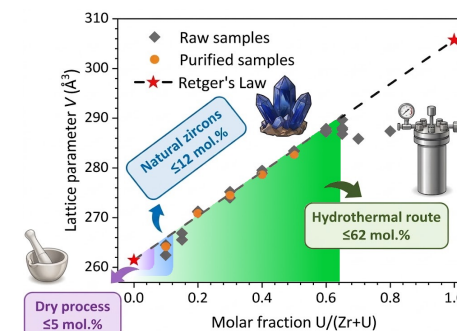
- Synthèse, caractérisation et purification de **solutions solides $Zr_{1-x}U_xSiO_4$** (ICSM, ESRF)
- Synthèse et caractérisation de **solutions solides $U_{1-x}Zr_xO_2$** (ICSM, ESRF)
- Détermination des **données thermodynamiques** (ICSM, WSU) $\Rightarrow$ **Modélisation thermodynamique** (ISAS)



Préparation de phases oxydes par précipitation hydroxyde



Préparation de phases silicatées par voie hydrothermale



WP1 Propriétés thermophysiques ($\Rightarrow$ Protect 2)

Thèse CEA (IRESNE) / CNRS (CEMHTI) – Oct. 2026

Post-Doc. CNRS (CEMHTI) – CEA (IRESNE) – Sept. 2026 (24 mois)

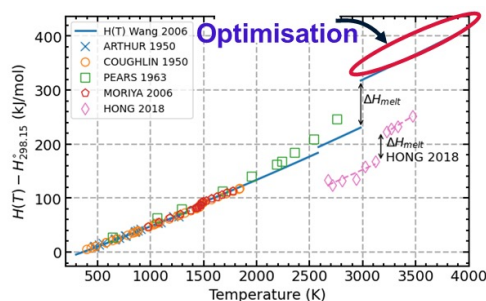
- Systèmes $\text{Al}_2\text{O}_3 - \text{ZrO}_2$ et $\text{Al}_2\text{O}_3 - \text{CaO} - \text{SiO}_2 - \text{ZrO}_2$
- Poursuite des **mesures d'enthalpie** et de **capacité calorifique**
 - Amélioration du dispositif et application aux mélanges oxydes
- Evaluation des **propriétés thermophysiques** (**densité**, **viscosité η** , **tension superficielle γ** ...)
 - $\Leftrightarrow$ Initiée dans d'autres thèses récentes
- Modélisation des structures des liquides par dynamique moléculaire (DM)
 - Etude des **relations** : **propriétés structurales** – **propriétés thermophysiques**
 - **Estimation des propriétés thermophysiques au-delà du champ de mesure**

Projet OCDE/NEA
COPS – 2024-2029
CORium Properties for reactor
Simulation and uncertainties

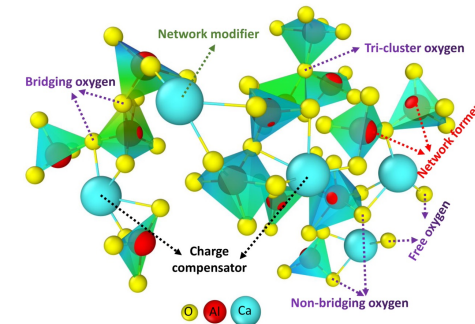
Thèse CEA
IRESNE / CEMHTI
C. Denier
2020-2023

Thèse CNRS
CEMHTI
Z. Zhang
2019-2023

Enthalpie de ZrO_2 (Pas de mesure à HT)



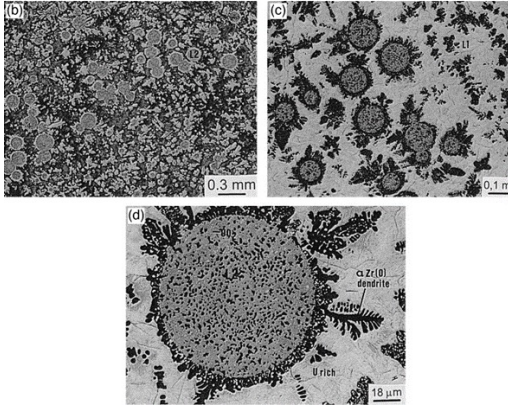
Banc de lévitation du CEMHTI



Structure des liquides par DM

WP1

Etude du système : $\text{UO}_2 + \text{Zr} + \text{ZrO}_2 + \text{Fe}$



Thèse CNRS (UMET, CIRIMAT) / CEA (ISAS) – Oct. 2026

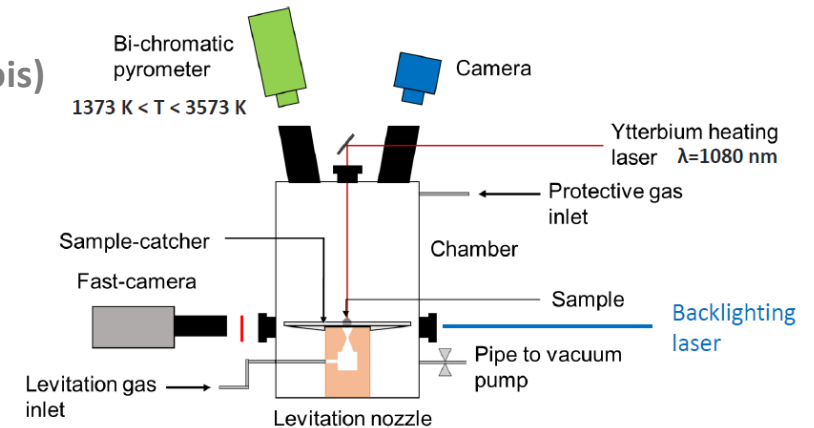
Etude thermodynamique du système Fe-O-U-Zr (corium en cuve)

- Système **Fe-O-U** puis **Fe-O-Zr** pour aller vers **Fe-O-U-Zr**
- Etudes expérimentales à **moyennes** ($< 1700^\circ\text{C}$) et **hautes températures** ($> 1700^\circ\text{C}$)
 - Four de trempe, Analyse thermique, Chauffage Laser
 - ⇒ **Equilibres de phases, phénomènes de démixtion** dans le liquide
- **Modélisation thermodynamique** (CALPHAD) ⇒ Implémentation de TAF-ID

Post-Doc. CEA (ISAS, IRESNE) / CNRS (UMET, ICSM, CIRIMAT) – Juil. 2026 (24 mois)

Etude expérimentale et par modélisation du système U-Zr-O-Fe-(Cr-Ni)

- Mesure de propriétés thermodynamiques et thermophysiques
- Mesures de **T_{fusion} (auto-creuset)** et de **densité (lévitation aérodynamique)** de coriums sur la plateforme ATTILHA



WP1 Systèmes (U,Zr)O₂ et (U,Zr)SiO₄ + PF : Ln, Sr, Ba, (Cs)

Thèse CNRS 1 (ICSM) / CEA (ISAS, ISEC) – Collab. ESRF, WSU et ASNR – Oct. 2026

Influence des PF's sur la stabilité des phases silicatées et oxydes, d'intérêt pour les coriums

- Synthèse et caractérisation (coll. ESRF) des phases d'intérêt par voies humides :
 - Différents éléments **lanthanides** (Ln = Ce, Nd, Gd, Yb, ...) pour étude du **fractionnement**
 - **Précipitation** d'hydroxyde (oxydes U, Zr + PF)
 - **Voie hydrothermale** (silicates U, Zr + PF) – *Adaptation nécessaire*
 - Optimisation des conditions de synthèse (et de purification si nécessaire)
- Etude des **propriétés thermodynamiques** (K_S , $\Delta_f H^\circ$, $\Delta_f S^\circ$)

Post-Doc. CNRS 2 (ICSM, IP2I) – CEA (ISEC, ISAS) (WP1 $\Leftrightarrow$ WP2) – Oct. 2026 (30 mois)

CLT des coriums en milieu aqueux: influence des PF's sur la stabilité et la lixiviation des phases oxydes et silicatées

- **Synthèse** des **phases individuelles**, d'**assemblages** et de **coriums reconstitués** représentatifs de coriums en cuve (oxydes) et hors cuve (silicates)
- **Impact des éléments aliovalents** : Ln, Sr, Ba, (Cs) et conséquences sur la spéciation de U

Thèse CEA / ASNR

ICSM / ISAS

A. Avallone

2024-2027

U

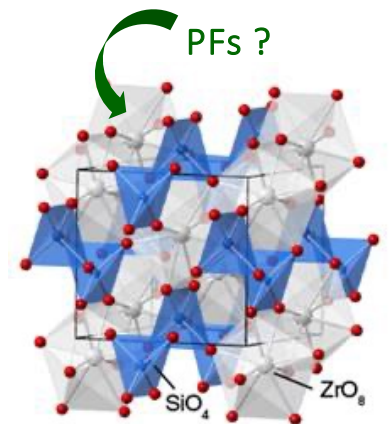
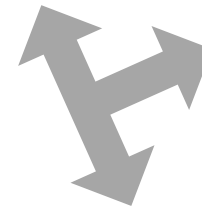
Thèse CEA

ISEC / ICSM

M. Rousselle

2025-2028

Pu

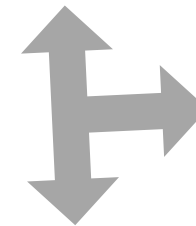


WP2 Cinétique et thermodynamique de la lixiviation de coriums

Post-Doc. CNRS 2 (ICSM, IP2I) – CEA (ISEC, ISAS) (WP1 $\Leftrightarrow$ WP2) – Oct. 2026 (30 mois)

Comportement à long terme : Phases individuelles $\Rightarrow$ Assemblages $\Rightarrow$ Coriums reconstitués

- **Cinétique** de lixiviation (milieux représentatifs)
- Phénomènes de **saturation** : caractérisation des phases néoformées
- **Suivi operando des interfaces** solide/solution en évolution (approche duale)



Thèse CEA

ICSM / ISEC

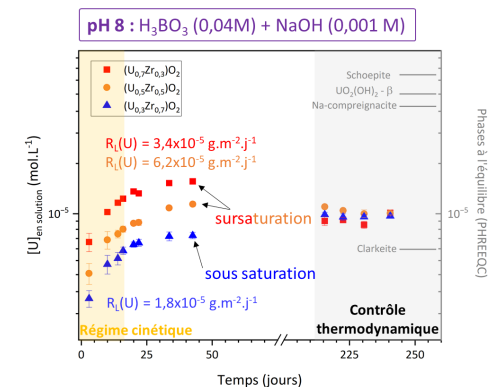
C. Navas

2024-2027

Thèse CNRS 3 (ICSM, IP2I) – CEA (ISEC) – Collaboration ASNR – Oct. 2027

Données de base pour la simulation du CLT des phases en milieu aqueux

- Vitesses de **lixiviation des phases pures**
- Vitesses de **relâchement des RN** (sélectivité, congruence/incongruence)
- Impacts de différents paramètres/scénarios
 - Conditions de refroidissement d'urgence
 - Conditions environnementales (e.g. eau de mer, ...)
- Solubilité des **phases néoformées** (oxydes, silicates) / Solubilités conditionnelles
- Suivi des interfaces en évolution $\Leftrightarrow$ **Mécanismes d'altération et de saturation**
- Vers le **couplage lixiviation – Irradiation** $\Rightarrow$ Impact des produits de radiolyse



WP2 Couplages irradiation/lixiviation et phénomène de water ingression

Post-Doc. CNRS 3 (IP2I, ICSM) – CEA (ISEC) – Oct. 2027 (18 mois)

- Lixiviation de matériaux homogènes et hétérogènes
 - **Irradiation des solides** : phases pures individuelles, assemblages, coriums reconstitués
 - Lixiviation séquentielle $\Rightarrow$ **Irradiation puis Lixiviation**
 - Lixiviation *in situ* $\Rightarrow$ **lixiviation sous irradiation** (impact des produits de radiolyse)
- Approche macroscopique : Impact des **hétérogénéités** : taille, occurrence, composition, localisation, ...
- Approche microscopique : **évolution de la topologie de l'interface**
 - Développement spécifique de cavités (milieux confinés)
 - Zones préférentielles de dissolution $\Rightarrow$ Hiérarchisation des phénomènes

Thèse ASNR – Oct. 2027

- Simulation numérique de **corium fragmenté sous eau** par progression continue de **fissures percolantes**
- **Impact des hétérogénéités** de composition du corium sur la taille et la vitesse de propagation des fissures
 - Présence de gouttes de métal non miscible
 - Existence d'un gradient vertical de composition (composés liés au béton)
- **Impression 3D du milieu fissuré** $\Rightarrow$ Mesures de la **perméabilité** $\Rightarrow$ Validation indirecte de l'approche numérique

PROJET 2 – Données Thermophysiques et Thermochimiques pour le Corium

Coordinateurs : Nicolas DACHEUX (CNRS) / Johann BOUCHET (CEA) / Michel SCHLEGEL (CEA)

Ressources Humaines

Personnels :

- Permanent (136 p.mois)
- Non-permanent (276 p.mois)



5 Thèses



7,5 ans Post-docs

Total : 412 p.mois

Budget & Moyens (PEPR)

2514 k€ (dont 50% RH)

- Plateformes de caractérisation
- Banc de lévitation
- Plateforme ATTHILA
- Outils calorimétriques
- Outils de modélisation thermo.
- Dispositifs de lixiviation
- Dispositifs de radiolyse
- Plateformes d'irradiation
- Grands instruments (ESRF)

Partenaires & Collaborations

Partenaires :

- ICSM, CEMHTI, IP2I, UMET, CIRIMAT
- CEA/IRESNE, CEA/ISAS, CEA/ISEC
- ASNR

- 4 thèses en co-encadrement
- 4 post-docs partagés
- Nombreux équipements partagés
- 2 Plateformes partagées