

## Proposition de thèse – 2025-2028

**Thématique : Matériaux en conditions extrêmes**

**Sujet de thèse : Radiolyse aux interfaces : simulation de la quantité de produits de radiolyses formés à l'interface Acier-316L/Eau**

**Directeur de thèse :** Yves Pison / Nicolas Bererd

**Téléphone :** 04-72-43-10-57

**Email :** [pison@ip2i.in2p3.fr](mailto:pison@ip2i.in2p3.fr) / [bererd@ip2i.in2p3.fr](mailto:bererd@ip2i.in2p3.fr)

**Adresse :** IP2I Lyon – Bureau 416

Domaine Scientifique de la Doua – Bât. Paul Dirac

4 rue Enrico Fermi – 69622 Villeurbanne Cedex - France

### Description du travail demandé :

Ce travail de thèse prend place dans l'axe de recherche *Radiolyse aux interfaces* étudié dans le groupe Matériaux en Conditions Extrêmes (MATICE) de l'IP2I. Il sera mené en interaction avec le travail de thèse de B. Lathuilière qui a débuté en 2024, dans la continuité de la thèse de P. Martinet [1] soutenue en février 2021. Ces travaux ont reçu le soutien du CNRS-MITI (Instrumentation in situ en conditions extrêmes) et du programme NEEDS (Nucléaire, Energie, Environnement, Déchets, Société). La thèse de P. Martinet a mis en évidence que la radiolyse de l'eau par l'irradiation de protons à pH 7 tend à augmenter le caractère oxydant d'un système Eau/Acier. Or, ce résultat est paradoxal car le film passif en surface de l'acier possède toutes les caractéristiques électrochimiques d'un film passif en cours de dissolution (c'est-à-dire de réduction). Nous avons fait l'hypothèse que l'eau liée, piégée dans la couche passive, est radiolysée<sup>1</sup> et qu'elle peut (i) interagir directement avec le métal comme si le film passif n'existait pas ou (ii) former du H<sub>2</sub>, espèce fortement réductrice *in situ* [2]. Les expériences d'irradiation ont été réalisées auprès d'accélérateurs d'ions à l'aide d'un dispositif expérimental innovant [3].

Toutefois, afin d'explorer les mécanismes de corrosion de l'acier-316L sous irradiation, il faut connaître la quantité de produits de radiolyse formés durant l'irradiation. Il faut aussi déterminer la distance entre leurs lieux de formation et l'interface Eau/Acier. C'est l'enjeu de ce travail de thèse. Deux grandes étapes sont à considérer :

- 1) Simuler le profil de la quantité d'énergie déposée par les protons incidents dans l'acier, à l'interface et dans l'eau. Deux codes de calcul seront utilisés : MCMPX ou GEANT-4 (couplé avec l'application GATE).
- 2) Utiliser le profil du dépôt d'énergie comme paramètre d'entrée à des logiciels (LPCHEM [4], MIRACLE [5]...) afin de simuler les profils de concentration des produits de radiolyse dans le cas de solutions chimiques non homogènes.

---

<sup>1</sup> Lorsqu'un gaz ou un liquide est irradié par une particule incidente, le dépôt d'énergie réalisé par cette dernière dans la phase irradiée peut rompre des liaisons chimiques. Les espèces formées, qui sont radicalaires, ioniques ou moléculaires, peuvent être très réactives et donner naissance à de nouvelles espèces chimiques dans le liquide ou le gaz. Ce phénomène est connu sous le nom de radiolyse.

Il s'agit d'une thèse à caractère fondamental. Le profil de candidat recherché est celui d'un physicien, à l'aise avec l'informatique. Il devra avoir une bonne connaissance des interactions des particules avec la matière. Enfin, des notions de cinétiques chimiques seraient un plus.

Références :

1. Martinet, P., *Effets de la radiolyse induite par des protons aux interfaces : application au cas d'un acier inoxydable en milieu Na<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>*, in *Matériaux*. 2021, Thèse Université Claude Bernard Lyon 1.
2. Béreard, N., N. Moncoffre, P. Martinet, S. Marcelin, D. Baux, and B. Normand, *Influence of Water Radiolysis on the Passive Properties of 316L-Stainless Steel*. *Chemphyschem*, 2024.
3. Normand, B., N. Bererd, P. Martinet, S. Marcelin, M. Moine, J. Feirrer, D. Baux, T. Sauvage, and N. Moncoffre, *Electrochemical behaviour of austenitic stainless steel under tribological stresses and irradiation*. *Corrosion Science*, 2020. **176**: p. 108945.
4. Ali, Y., L. Auzel, C. Monini, K. Kriachok, J.M. Létang, E. Testa, L. Maigne, and M. Beuve, *Monte Carlo simulations of nanodosimetry and radiolytic species production for monoenergetic proton and electron beams: Benchmarking of GEANT4-DNA and LPCHEM codes*. *Medical Physics*, 2022. **49**(5): p. 3457-3469.
5. Bradshaw, G., M. O'Leary, A.S.F. Purser, B. Villagomez-Bernabe, C. Wyatt, F. Currell, and M. Webb, *A new approach for simulating inhomogeneous chemical kinetics*. *Scientific Reports*, 2023. **13**(1).

## PhD thesis proposal – 2025-2028

**Research field:** Materials in Extreme Conditions

**Thesis title:** Radiolysis at Interfaces: Simulation of the Quantity of Radiolysis Products Formed at the 316L Steel/Water Interface

**Supervisor:** Yves Pison / Nicolas Bererd

**Phone:** 04-72-43-10-57

**Email:** [pipton@ip2i.in2p3.fr](mailto:pipton@ip2i.in2p3.fr) / [bererd@ip2i.in2p3.fr](mailto:bererd@ip2i.in2p3.fr)

**Address:** IP2I Lyon – Bureau 426

Domaine Scientifique de la Doua – Bât. Paul Dirac

4 rue Enrico Fermi – 69622 Villeurbanne Cedex - France

### Work description:

This thesis work is part of the Radiolysis at Interfaces research axis, initiated in 2014 within the Materials in Extreme Conditions group. It follows the thesis of P. Martinet [1], defended in February 2021. This work will interact with the thesis work of B. Lathuilière, which began in 2024. These studies have been supported by MITI (Instrumentation in situ under extreme conditions) and by the NEEDS program (Nuclear, Energy, Environment, Waste, Society). P. Martinet's thesis demonstrated that the radiolysis of water by proton irradiation at pH 7 tends to increase the oxidizing nature of a Water/Steel system. However, this result is paradoxical because the passive film exhibits all the electrochemical characteristics of a passive film undergoing dissolution (i.e., reduction). We hypothesized that the bound water, trapped in the passive layer, undergoes radiolysis and that it can (i) directly interact with the metal as if the passive film did not exist or (ii) form H<sub>2</sub>, a highly reducing species in situ [2]. The irradiation experiments were carried out using ion accelerators with the help of an innovative experimental setup [3].

However, to explore the mechanisms of corrosion of 316L steel under irradiation, it is necessary to know the amount of radiolysis products formed during irradiation. It is also necessary to determine the distance between their formation sites and the Water/Steel interface. This is the focus of this thesis work. Two major steps must be considered:

1. Simulate the profile of the energy deposited by the incident proton in the steel, at the interface, and in the water. Two software programs will be used: MCMPX or GEANT-4 (coupled with the GATE application).
2. The energy deposition profile will serve as an input parameter for software (LPCHEM [4], MIRACLE [5]...) that simulates the concentration profiles of radiolysis products in non-homogeneous chemical solutions.

This is a fundamental thesis; a physicist profile is sought. The candidate must be comfortable with computing and must have a good understanding of particle interactions with matter. Finally, knowledge of chemical kinetics would be a plus.

References :

1. Martinet, P., *Effets de la radiolyse induite par des protons aux interfaces : application au cas d'un acier inoxydable en milieu Na<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>*, in *Matériaux*. 2021, Thèse Université Claude Bernard Lyon 1.
2. Béreard, N., N. Moncoffre, P. Martinet, S. Marcelin, D. Baux, and B. Normand, *Influence of Water Radiolysis on the Passive Properties of 316L-Stainless Steel*. *Chemphyschem*, 2024.
3. Normand, B., N. Bererd, P. Martinet, S. Marcelin, M. Moine, J. Feirrer, D. Baux, T. Sauvage, and N. Moncoffre, *Electrochemical behaviour of austenitic stainless steel under tribological stresses and irradiation*. *Corrosion Science*, 2020. **176**: p. 108945.
4. Ali, Y., L. Auzel, C. Monini, K. Kriachok, J.M. Létang, E. Testa, L. Maigne, and M. Beuve, *Monte Carlo simulations of nanodosimetry and radiolytic species production for monoenergetic proton and electron beams: Benchmarking of GEANT4-DNA and LPCHEM codes*. *Medical Physics*, 2022. **49**(5): p. 3457-3469.
5. Bradshaw, G., M. O'Leary, A.S.F. Purser, B. Villagomez-Bernabe, C. Wyatt, F. Currell, and M. Webb, *A new approach for simulating inhomogeneous chemical kinetics*. *Scientific Reports*, 2023. **13**(1).