GDR CNRS 3584 TherMatHT
Thermodynamique des Matériaux à Haute Température

GDR Verres
GDR 3338

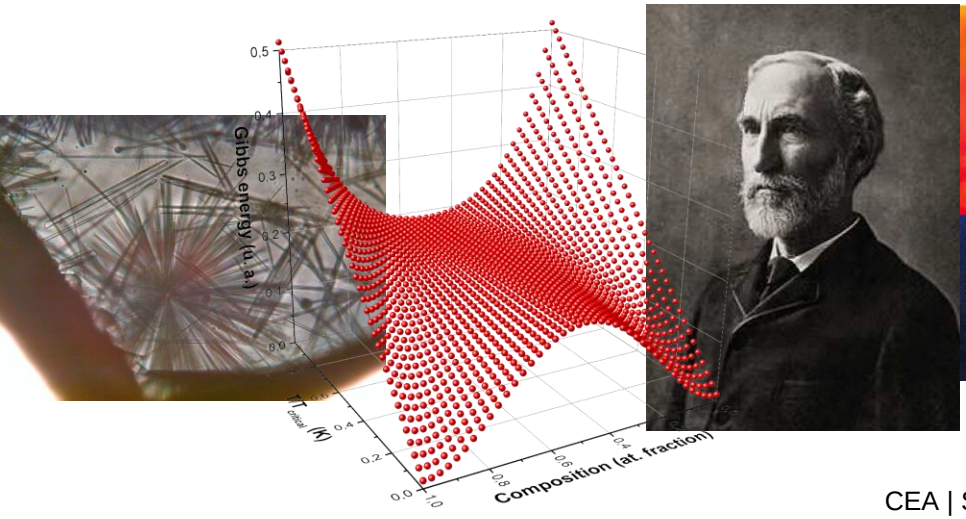
UNION POUR LA SCIENCE ET LA TECHNOLOGIE VERRIÈRES

IPGP
INSTITUT DE PHYSIQUE DU GLOBE DE PARIS

Atelier commun GDR TherMatHT GDR Verre/USTV

Thermodynamique des verres – 09 octobre 2017

P. Benigni, S. Gossé, G. Lelong, M. Micoulaut, D. Neuville, A. Pisch, J. Rogez, S. Schuller

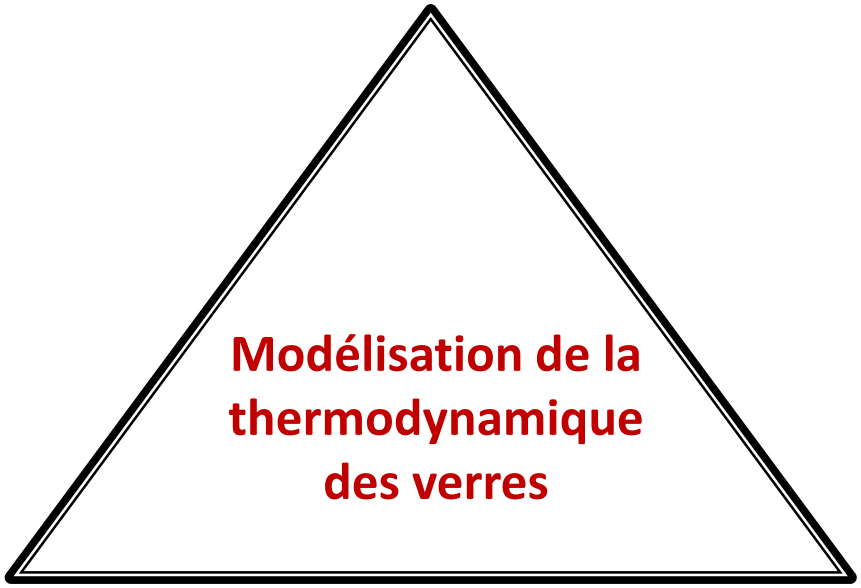


Atelier thermodynamique des verres

Communauté thermodynamique haute température

UNION POUR LA SCIENCE ET LA TECHNOLOGIE VERRIÈRES

Recherche appliquée et Industrielle



GDR Verres GDR 3338

Recherche académique

Communauté des verres

Mise en commun des connaissances et des réflexions entre les communautés du verre et de la thermodynamique

Le verre : un système hors équilibre

Par nature le verre est un système hors équilibre

Il n'existe pas ou peu de diagrammes de phases de verres

prenant en compte les <u>phases métastables</u>

Diagramme de phase SiO_2-CaO
Stable

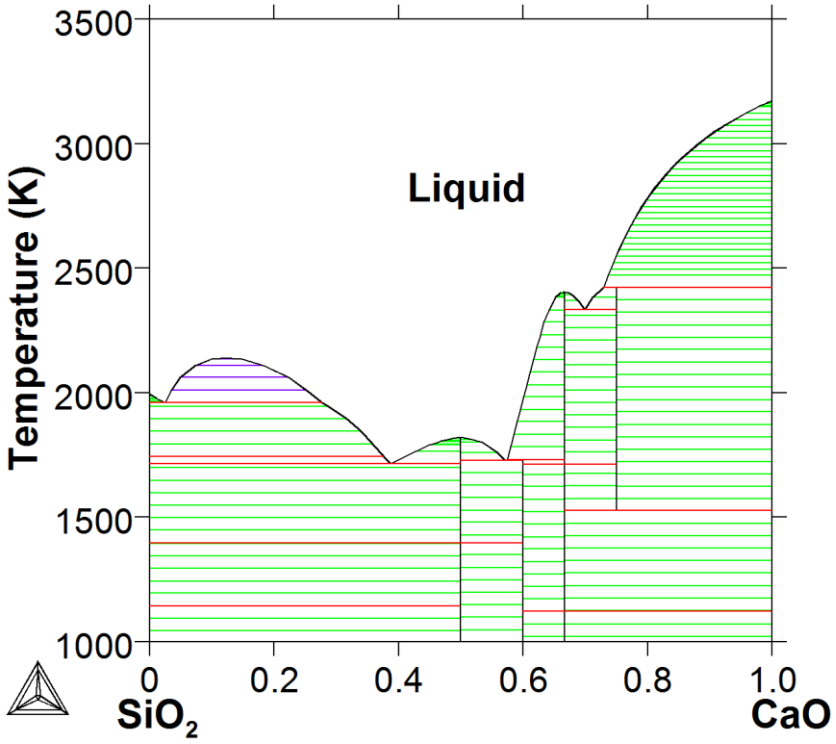


Diagramme de phase SiO_2-CaO
Métastable (suspension de phases)

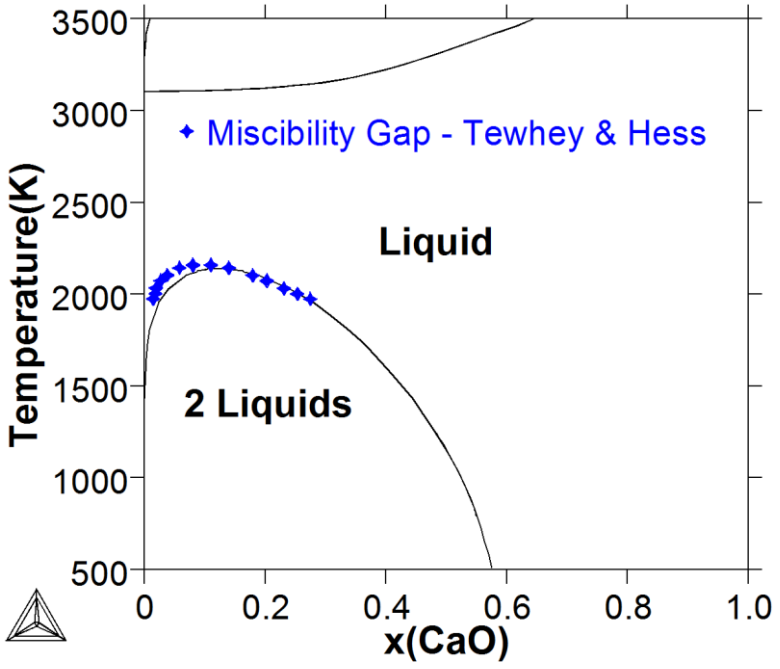
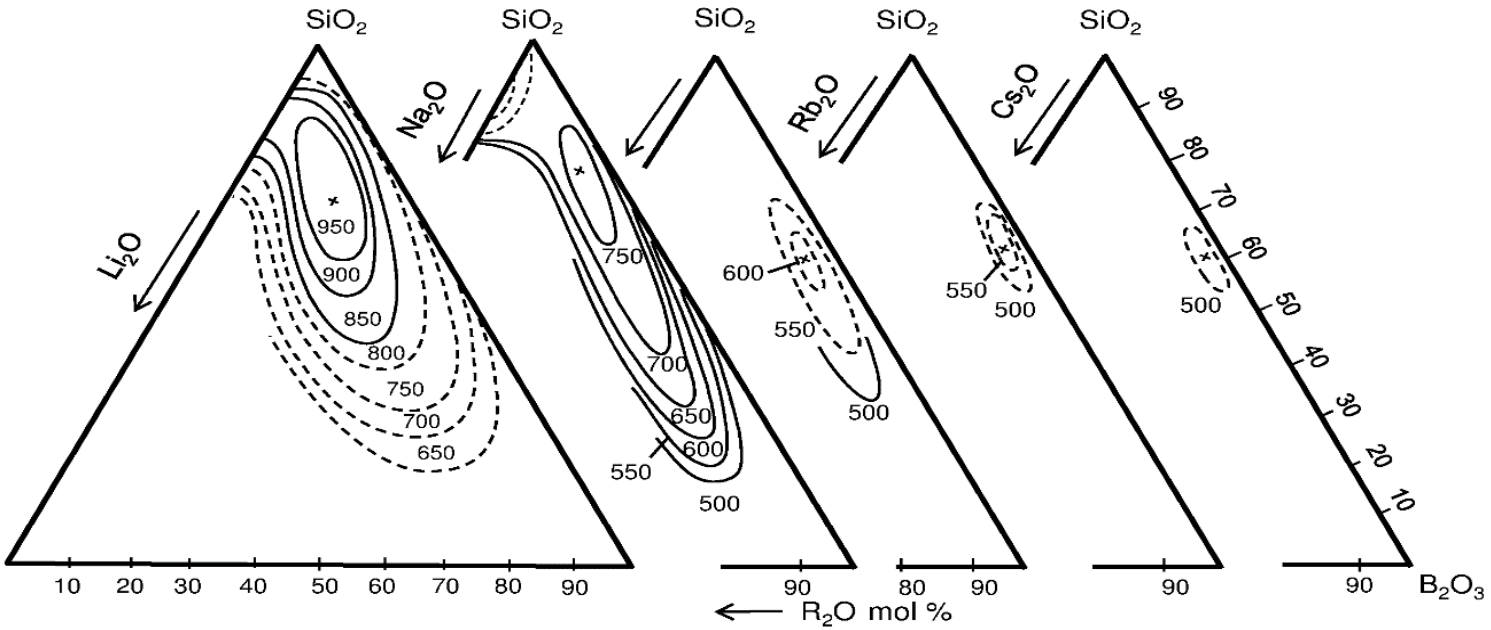


Diagramme de phase : calcul Thermo-Calc Stéphane Gossé

Le verre : un système hors équilibre

Existence de données expérimentales : Lacune de miscibilité dans les verres borosilicates d'alcalins



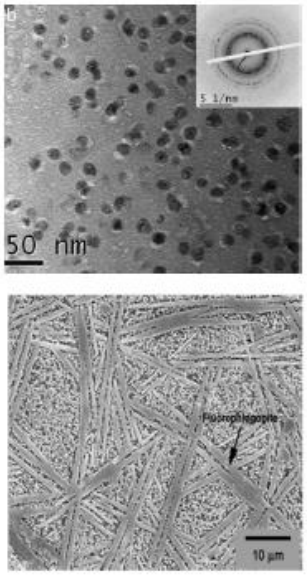
D'aprés Porai-Koshits, E.A., *Phase separation in glass*, ed. E.A.P.-K. O.V Mazurin. 1984, Amsterdam, New York ; North-Holland

Pourquoi modéliser les propriétés thermodynamiques des verres (phases métastables) ?

Des objectif industriels

- Modèle qui permettrait de prédire les domaines vitrifiables et les mécanismes à l'origine de la formation d'hétérogénéités (cristallisation, séparation de phase).

- Orienter les compositions des verres en fonction des propriétés physico-chimiques recherchées.



Exposé Atelier 2016 : M. Allix

Comment modéliser les propriétés thermodynamiques des verres (phases métastables) ?

Les questions scientifiques à résoudre

1. Comment décrire l'évolution des grandeurs thermodynamiques proche de la transition vitreuse ?

2. Méthode d'optimisation de diagrammes de phase - Comment extrapoler les données du liquide (phase à l'équilibre) au liquide surfondu (métastable) et au verre (hors équilibre) ?

3. Quelles cinétiques de transformations de phases prendre en compte (nucléation, croissance) ?

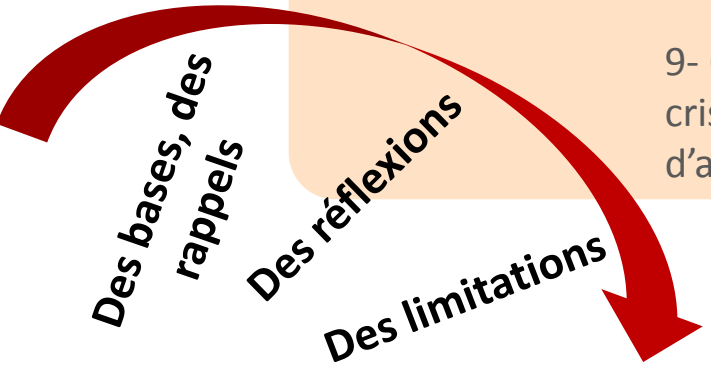
Quelle méthodologie adoptée ?

Des objectifs scientifiques

- ✓ **Développer une méthodologie** pour modéliser les diagrammes de phases de verre
- ✓ **Réaliser** un premier calcul prenant en compte des modèles simples (verres d'oxydes)
- ✓ **Complexifier** le modèle (acquisitions de données thermodynamiques, cinétiques, structurales, diffusion, viscosité)
- ✓ **Valider** les modèles - Itération

Programme de l'atelier 2016
11 octobre 2016 – Université de Marseille

1- Introduction de l'atelier	*Jacques Rogez - Université Marseille*
2- Représentation thermodynamique d'un système à l'équilibre	*Stéphane Gossé - CEA Saclay*
3- Viscosité des verres d'oxydes - Lien entre structure et propriétés	*Daniel Neuville IPGP*
4- Évolution des grandeurs thermodynamiques proche de la transition vitreuse	*Pierre Benigni - Université Marseille*
5- Structure des verres/liquides boratés et borosilicatés	*Laurent Cormier - UPMC*
6- Décrire la transition vitreuse : simulations moléculaires et approches topologiques	*Matthieu Micoulaut - UPMC*
7- Prise en compte des phases vitreuses dans la description thermodynamique	*Nicolas David IJL- Université Nancy*
8- Cinétiques de démixtion et de cristallisation - Théorie	*Sophie Schuller - CEA Marcoule*
9- Contrôle de la démixtion et de la cristallisation dans les verres - Exemples d'applications	*Mathieu Allix CEMHTI - Orléans*



Programme de l'atelier du 09 octobre 2017

9h15-9h30	Exposé introductif	Sophie Schuller (CEA Marcoule)
Les modèles de description du verre		
9h30-10h30	Revue des modèles thermodynamiques de description des verres polyconstitués	Pierre Benigni (IM2MP, Marseille)
10h30-11h00	Exemple d'application du "two state model" dans les systèmes polyconstitués	Stéphane Gossé (CEA Saclay)
11h00-11h30	Etat de l'art sur l'extrapolation des oxydes simples dans les bases CALPHAD	Alexander Pisch (SIMAP, Grenoble)
Détermination des grandeurs thermodynamiques		
11h30-13h00	Mesure et modèle de Cp Utilisation des mesures de viscosité pour déterminer les entropies de configuration	Daniel Neuville (IPGP, Paris)
Pause déjeuner 13h00-14h15		
14h15-15h00	Modélisation des propriétés thermodynamiques par une approche topologique	Matthieu Micoulaut (UPMC, Paris)
Description des paramètres d'interaction dans les liquides		
15h00-15h45	Revue des modèles (quasi-chimique, associé)	Alexander Pisch (SIMAP, Grenoble)
15h45-16h30	Utilisation des données structurales des verres et des liquides pour décrire les paramètres d'interactions	Gerald Lelong (UPMC, Paris)/Stéphane Gossé (CEA Saclay)
16h30-17h30	Discussion du choix des modèles et de la méthodologie à adopter pour modéliser le verre et le liquide	

GDR Verres
GDR 3338

UNION POUR LA SCIENCE ET LA TECHNOLOGIE VERRIÈRES

IPGP
INSTITUT DE PHYSIQUE DU GLOBE DE PARIS

Les présentations pourront être consultées sur le site du GDR TherMatHT

https://atv2017.sciencesconf.org/

Merci aux GDR verres, GDR TherMatHT, merci à l'USTV, l'IPGP, Olivier Rapaud (SPCTS Limoges)