GdR 3584 - TherMatHT
Thermodynamique des Matériaux à Hautes Températures

ECOLE D'ÉTÉ

« La donnée thermodynamique : de l'acquisition à l'application… »

13 - 18 septembre 2015
La Vieille Perrotine
Saint Pierre d'Oléron

ENJEUX

Les impératifs d'allègement des structures, de diminution des coûts, d'économie de matières premières et d'énergie, et de durabilité conduisent d'une manière générale à des cahiers des charges de plus en plus contraignants qui ont pour solutions **des matériaux de complexité croissante**. Ces nouvelles générations de matériaux ont des propriétés qui résultent des caractéristiques physiques et chimiques de **l'assemblage d'un grand nombre de phases et d'éléments**. Cette recherche de matériaux nouveaux ou optimisés requiert des approches scientifiquement fondées. Parmi les outils dont l'ingénieur dispose, le **calcul des propriétés du matériau à partir de celles des phases présentes dans les conditions d'équilibre thermodynamique** a connu un essor considérable notamment grâce à la méthode CALPHAD. Potentiellement applicable à de très nombreux domaines, cette approche s'avère particulièrement adaptée au domaine des hautes températures auxquelles les matériaux en question tendent rapidement vers l'état d'équilibre thermodynamique. Le terme haute température doit être pris dans un sens relatif : 2000°C pour le tungstène correspond à 600°C pour les composés chlorés ou ceux utilisés en optoélectronique, ou encore 300°C pour les composés organométalliques, par exemple.

On dispose aujourd'hui de **bases de données thermodynamiques et de logiciels** qui sont des outils très puissants pour la conception et la compréhension du comportement des matériaux au cours de leur élaboration et pendant leur utilisation. Cependant, comme pour tous les outils de simulation, leurs résultats dépendent de la qualité et de la fiabilité des données qui les alimentent.

Cette école thématique « de l'acquisition des données jusqu'à l'application » est organisée par le groupement de recherches *TherMatHT* du CNRS qui a été créé en janvier 2013. L'approche que nous proposons est de **réaliser une présentation de la thermodynamique appliquée aux matériaux hautes températures sous l'angle particulier de la donnée thermodynamique**. Cette donnée doit être **mesurée**, parfois **estimée** ou **calculée** dans le cas des phases non stables ; elle doit également faire l'objet d'une **optimisation** permettant sa mise en banque en vue de nourrir les calculs qui supportent ensuite le développement des procédés d'élaboration et de transformation.

OBJECTIFS

L'organisation d'une école d'été répond tout d'abord à un **objectif de formation et de remise à niveau pour un public très large, allant du doctorant à l'ingénieur du secteur industriel**. La tenue d'une école sur la thématique de l'acquisition et l'utilisation des données en thermodynamique des matériaux haute température est une première. Des écoles thématiques sur les calculs thermodynamiques sont régulièrement organisées depuis quelques années à l'initiative de l'INSTN : l'école que nous proposons ici sur les données, leur acquisition et leur utilisation, sera tout à fait complémentaire des aspects calculs.

L'école thématique sera aussi **un lieu d'échanges et de rencontres permettant de faciliter les transferts de connaissances et de compétences** indispensables à la pérennisation des savoirs et savoir-faire de la discipline. L'objectif scientifique réside dans la proposition d'une approche spécifique et originale de la thermodynamique en abordant et en introduisant les concepts clés par le biais de la donnée thermodynamique, de son acquisition à son utilisation. Nous espérons de cette approche **une présentation un peu moins académique, plus centrée sur des aspects pratiques qui permettra d'éclairer sous un jour différent les connaissances acquises auparavant par les participants, leur permettant ainsi une meilleure intégration des subtilités de la thermodynamique**.

Enfin, notre dernier objectif scientifique est de produire à l'issue de l'école un écrit publiable qui présentera un état de l'art des connaissances actuelles sur la thermodynamique appliquée aux matériaux à haute température.

PRE-REQUIS

Des connaissances de bases en thermodynamique et en sciences des matériaux en général sont indispensables pour profiter pleinement du contenu scientifique de l'école. Une liste d'ouvrages de références et quelques liens informatiques seront communiqués aux participants *avant* la tenue de l'école afin de faciliter leur préparation. De plus, **le programme prévoit au cours de la première journée une présentation succincte des principes de bases qui seront ensuite utilisés dans les autres cours**.

PUBLIC CONCERNE

Les **chercheurs** universitaires, les (post)**doctorants** ainsi que les **ingénieurs du secteur industriel** concernés par les procédés d'élaboration et de transformation des matériaux à haute températures trouveront dans cette école un rappel des concepts théoriques de bases et pourront également prendre connaissance d'un état de l'art actualisé des techniques d'acquisition et de traitement des données thermodynamiques.
Une **large place sera également accordée aux études de cas pratiques**, tant au niveau des travaux dirigées de l'après midi que lors de séances dédiées. Par ailleurs, des temps d'échanges informels seront également organisés afin de permettre à chacun de discuter avec les intervenants autour de ses problématiques d'intérêt.

PROGRAMME PREVISIONNEL et INTERVENANTS

L'école thématique sera structurée en 5 journées au cours desquelles seront abordées 4 thématiques différentes : sous forme de cours le matin et de travaux dirigés l'après midi.

Jour 1 : Les données de la phase
(J. Rogez, P. Benigni, M. Lomello, A. Pisch, M. Palumbo, J.C. Crivello)
- Rappels et précisions
- Méthodes de mesures
- Les fonctions thermodynamique et la physique de l'état condensé
- L'apport des méthodes de calcul *ab-initio*

Jour 2 : Les données d'équilibres multiphasés multiphasés
(J.M. Joubert, C. Chatillon, J. Rogez, M. Lomello, O. Dezellus, C. Guéneau, S. Chatain)
- Rappels sur les équilibres multiphasés
- Mesures expérimentales de diagrammes de phases par méthodes isothermes (Traitement thermique, DRX, neutrons, métallographie, Microsonde – EDS, WDS)
- Mesures expérimentales de diagrammes de phases par méthodes thermiques (ATD, DSC, Dilatométrie, RX en température)
- Mesures thermodynamiques relatives à l'équilibre des phases (Force électromotrice, spectrométrie de masse, méthodes de transport).

Jour 3 : Optimisation des données
(J.M. Fiorani, N. Dupin, C. Guéneau, A. Pisch)
- Les modèles de phases : prise en compte de la structure, de l'ordre à courte distance, des interactions
- Principe de l'optimisation d'un système
- Revue critique de la littérature, sélection des données

Jour 4 : Phases hors d'équilibre, métastabilité, verres
(S. Gossé, P. Benigni, J. Rogez, A. Pisch)
- Critères de stabilité
- La démixtion
- Description des phases vitreuses dans les bases de données
- Les matériaux vitreux (oxydes, métalliques…)

Jour 5 (matinée): Etude de cas
(O. Dezellus, C. Chatillon, A. Gabriel, A. Pisch, S. Schuller, A. Antoni, C. Toffolon)
- Des exemples seront proposés dans différents domaines allant de la métallurgie aux oxydes en passant par les sels fondus. Parmi les thématiques proposées : les systèmes Si-C-O et Al-C-O (production de SiC et électrolyse de Al2O3), purification de Si (industrie microélectronique), clinckerisation du ciment (industrie cimentière), etc. D'autres études de cas pourront être proposées en fonction des demandes des participants.

INSCRIPTIONS

Réservez les dates et pré-inscrivez-vous !

Les personnes intéressées sont invitées à se pré-inscrire sur le lien AZUR COLLOQUES :

https://www.azur-colloque.fr/DR12

COMITE SCIENTIFIQUE

Marc Barachin (IRSN)
Pierre Benigni (IM2NP)
Christian Chatillon (INPG)
Jean-Claude Crivello (ICMPE)
Olivier Dezellus (LMI)
Christophe Drouet (CIRIMAT)
Jean-Marc Fiorani (IJL)
Stéphane Gossé (CEA)
Christine Guéneau (CEA)
Jean-Marc Joubert (ICMPE)
Marc Lomello-Tafin (SYMME)
Alexander Pisch (Lafarge)
Olivier Rapaud (LPCTS)
Jacques Rogez (IM2NP)
Sophie Schuller (CEA)
Francis Teyssandier (LCTS)

Une question sur le GdR ? Un complément d'information ?

visitez notre site web :

http://gdr-thermatht.cnrs.fr/