

Proposition de stage M2 2018-2019

Responsables du stage

Nom : Cormier Laurent

Localisation : IMPMC - 4 place Jussieu,
75005 Paris – Tour 23-24 – 4^{ème} étage –
pièce 414

Equipe : PALM (Propriétés des Amorphe, Liquides et Minéraux)

Courriel : laurent.cormier@sorbonne-universite.fr

Téléphone : +33 (0)1 44 27 52 39

Page web : <http://www-ext.impmc.upmc.fr/~cormier/>

Sujet du stage : Mécanismes de diffusion et de nucléation dans les verres silicatés

Une des questions les plus pertinentes dans la science du verre concerne notre ignorance sur la nature des entités diffusantes qui contrôlent la nucléation/croissance dans les matériaux non-cristallins (la nucléation/croissance dans les verres survient après des traitements thermiques au-delà de T_g , la température de transition vitreuse). Cette information est très pertinente parce que toutes les équations existantes de la nucléation/croissance font intervenir le coefficient de diffusion de ces entités inconnues.

Les équations de Stokes-Einstein/Eyring sont fréquemment utilisées pour estimer les coefficients de diffusion en utilisant des données de viscosité à haute température. Les mécanismes de nucléation/croissance de cristaux dans les verres ont reçu une attention croissante, non seulement pour le développement ou l'amélioration de vitrocéramiques fonctionnelles, mais aussi pour fournir des moyens indirects permettant de déduire les coefficients de diffusion dans une plage de température plus large.

Dans cette recherche, nous prévoyons de calculer les coefficients de diffusion à travers différentes approches expérimentales et numériques (dynamique moléculaire) et d'utiliser ces coefficients pour tester la théorie de la nucléation, et plus spécifiquement l'approche étendue de Gibbs permettant de s'affranchir de l'approximation capillaire assimilant le germe cristallin à une version réduite du cristal macroscopique.

Les entités diffusantes contrôlant la nucléation peuvent varier en fonction de la température (proche ou loin de T_g). Cet aspect sera abordé par une étude expérimentale des phases métastables se formant lors des premiers stades de la nucléation proche de T_g , offrant un point de comparaison avec les modélisations atomistiques issus de la dynamique moléculaire.

L'étudiant aura ainsi la possibilité de se former à la fois sur des aspects expérimentaux (synthèse, mesures physiques sur des verres) et numériques (dynamique moléculaire).

L'ensemble de ces données permettant de comparer coefficients de diffusion, seuil de nucléation, et structure interne, devrait offrir un point de vue original sur les transformations d'état dans les matériaux.

Techniques utilisées : synthèse de verres, diffraction des rayons X, ATD-DSC, calculs numériques

Stage rémunéré : OUI

Ce stage pourra-t-il se poursuivre en thèse : OUI

Si oui, financement envisagé : ministère