

Le laboratoire CEMHTI organise les

1^{ères}

Journées Annuelles



AFTherMat
2023

9 et 10

novembre 2023

Orléans

Hôtel Dupanloup

à destination des chercheurs,
post-doctorants, doctorants et ingénieurs,
des secteurs académique et industriel

**Programme et
résumés**



► Hôtel Dupanloup - Université d'Orléans
1 rue Dupanloup - 45000 ORLÉANS

► dupanloup@univ-orleans.fr

► 02 38 21 14 70

► Visite virtuelle : https://youtu.be/TH23XAmLt_U



► Parking

Il est interdit de se garer dans la cour du bâtiment. Il est possible d'y stationner le temps de charger ou décharger du matériel si nécessaire.

► Parkings souterrains à proximité

[Cathédrale](#) - 346 places

Coordonnées GPS :
47.9014050/1.9109130

[Hôtel de ville](#) - 475 places

Coordonnées GPS :
47.9033110/1.9100440

► Lignes de Tram

[Ligne A](#) - Arrêt « Charles de Gaulle »
puis prendre la ligne B

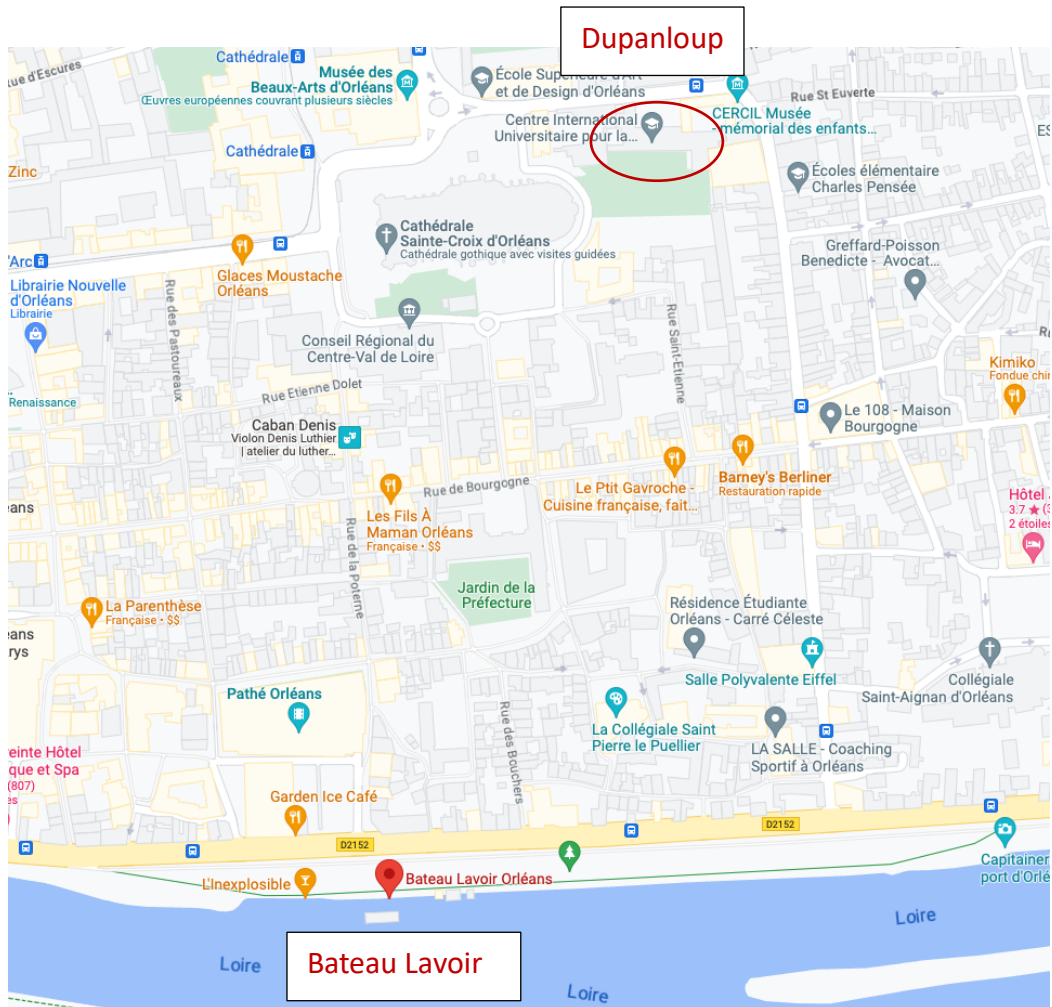
[Ligne B](#) - Arrêt « Hôtel de Ville »

RESTAURANT DINER – 19H00



Bateau Lavoir Orléans

Restaurant le BATEAU LAVOIR
1 place Châtelet
Orléans



Jeudi 9 novembre 2023 – 9:00 – 17:30

9:00	ACCUEIL DES PARTICIPANTS	
9:30	OUVERTURE DES JOURNÉES	
9:45	SESSION MODÉLISATION THERMODYNAMIQUE (Jean-Marc JOUBERT, Kaoutar NACIRI)	
9:45	P01	Pierre BENIGNI (IM2NP – CNRS, Aix-Marseille) <i>Intérêt du modèle régulier à 2 états pour la description des liquides unaires</i>
10:00	P02	Julien GARCIA (ICMPE – CNRS, Thiais) <i>Modélisation Calphad des systèmes cubiques centrés pour le stockage solide de l'hydrogène</i>
10:15	P03	Jean-Marc FIORANI (IJL – CNRS, Nancy) <i>Thermodynamic modelling of the Mo-Pt system based on the NACEF approach</i>
10:30	P04	Éloi DE VILLOUTREYS (LM2T – CEA Saclay, Gif-sur-Yvette) <i>Équilibres de phases et limites de solubilité dans le système (Ce,Nd)-Fe-B pour des nouveaux aimants permanents substitués</i>
10:45	P05	Silvère BARRAT (IJL – CNRS, Nancy) <i>Approche thermodynamique de la cristallisation de la perovskite thermochrome SmNiO_3 à partir de la phase amorphe</i>
11:00	PAUSE	
11:30	SESSION MODÉLISATION THERMODYNAMIQUE (Pierre BENIGNI, Eloi DE VILLOUTREYS)	
11:30	P06	Agustin FLORES (ICMPE – CEA Paris-Saclay, Gif-sur-Yvette) <i>Étude expérimentale et évaluation thermodynamique des systèmes constitutifs du système Cr-Fe-Mo-Ti</i>
11:45	P07	Jean-Marc JOUBERT (ICMPE – CNRS, Thiais) <i>Estimation des Cp de composés à base d'aluminium en utilisant l'approche de Neumann-Kopp (NK), une approche NK inverse et une approche NK modifiée</i>
12:00	P08	Kaoutar NACIRI (SIMaP – CNRS, Saint-Martin-d'Hères) A08 <i>Modélisation du diagramme de phases pseudo-binaire $\text{Li}_2\text{O}-\text{MoO}_3$</i>
12:15	P09	Jérôme ANDRIEUX (LMI – CNRS, Villeurbanne) <i>Système B-C-Si : modélisation thermodynamique pour la croissance par CVD de B_xC sur 4H-SiC</i>
12:30	DÉJEUNER	
14:00	SESSION ACQUISITION (Jérôme ANDRIEUX, Augustin FLORES)	
14:00	P10	Pierre-Jean PANTEIX (IJL – CNRS, Nancy) A09 <i>Étude thermodynamique de l'influence de l'addition d'alumine Al_2O_3 dans le système $\text{CaO}-\text{SiO}_2-\text{YO}_{1,5}$</i>
14:15	P11	Caroline DENIER (LEAG – CEA Cadarache, Saint-Paul lez Durance) <i>Mesures expérimentales de propriétés thermophysiques du corium et de ses composants liquides à haute température</i>
14:30	P12	Olivier DEZELLUS (LMI – CNRS, Villeurbanne) <i>Liquidus à très faible concentration : mesure et modélisation (exemple de Mg-Fe)</i>
14:45	P13	Refat RAZOUK (LNE, Trappes) <i>Mesure de la capacité thermique massique d'un échantillon d'alumine à haute température par calorimétrie à chute</i>
15:00	P14	Ioana NUTA (SIMaP – CNRS, Saint-Martin-d'Hères) <i>Phase gazeuse de K_2TaF_7</i>
15:15	P15	Thomas VAUBOIS (Safran Tech, Magny-Les-Hameaux) <i>Couplage de méthodes numériques et expérimentales appliquées à la conception d'alliages de titane pour applications à haute température</i>
15:30	PAUSE	
16:00	ASSEMBLÉE GÉNÉRALE	

Vendredi 10 novembre 2023 – 8:30 – 12:00

8:30	ACCUEIL DES PARTICIPANTS	
	CONFÉRENCE INVITÉE (Olivier DEZELLUS, Caroline DENIER)	
9:00	P16	Ilse ERMINI (CEMHTI – CNRS, Orléans) <i>Development and application of a Rapid Scan technique for emissivity measurements of cooled down molten materials</i>
9:30	SESSION CALCULS (Thomas VAUBOIS, Julien GARCIA)	
9:30	P17	Christophe JOURNEAU (LEAG – CEA Cadarache, Saint-Paul lez Durance)
	A10	<i>Exercice de comparaison de mesures de propriétés thermophysiques à hautes températures</i>
9:45	P18	Arthur TOURNEIX (LMAG – CEA Cadarache, Saint-Paul lez Durance) <i>Évaluation thermodynamique de tensions de surfaces liquide-gaz de mélange U-O-Zr avec l'équation de Butler</i>
10:00	P19	Christian CHATILLON (Conseil, Meylan) <i>Pressions d'oxygène mesurées par transport ou transpiration sur les oxydes : cas de UO_2 à haute température</i>
10:15	PAUSE	
	SESSION APPROCHES COUPLÉES & IA (Christophe JOURNEAU, Arthur TOURNEIX)	
10:45	P20	Gildas GUILLEMOT (CEMEF Mines Paris PSL, Sophia Antipolis) <i>Thermodynamique des interfaces en croissance hors équilibre – Modélisation de la solidification des alliages multicomposés</i>
11:00	P21	Serge MAILLARD (LM2C – CEA Cadarache, Saint-Paul lez Durance) <i>Molecular Dynamics modeling of thermodiffusion in solids presenting charged defects. The example of uranium dioxide</i>
11:15	P22	Guillaume DEFFRENNES (SIMaP – CNRS, Saint-Martin-d'Hères) <i>Prédiction de liquidus binaires et d'enthalpies de mélange par machine learning</i>
11:30	CLOTURE DES JOURNÉES	

POSTERS

- A1 **Adrien FOURMONT** (CEA Valduc, Is-sur-Tille)
Modélisation de l'évolution microstructurale d'alliages δ -PuAl en fonction de la température
- A2 **Mathias DESSEAUX** (LMI – CNRS, Villeurbanne)
Étude expérimentale à haute température, haute pression et modélisation CALPHAD du système Mg-Fe
- A3 **Rkia TAMIM** (DRT/LITEN/DTNM/SA3D/LFM CEA, Grenoble)
Alliages à haute entropie par approche thermodynamique et densification rapide de poudres
- A4 **Adrien CROCHETET** (CEMHTI – CNRS, Orléans)
Développement d'un banc de lévitation aérodynamique pour des mesures d'enthalpie par calorimétrie à chute inverse
- A5 **Gildas GUILLEMOT** (CEMEF Mines Paris PSL, Sophia Antipolis)
Modélisation du processus de microségrégation en solidification rapide – Application à l'alliage d'intérêt aéronautique IN718
- A6 **Renaud VALOIS** (CEMHTI – CNRS, Orléans)
Non-equilibrium synthesis of new transparent ceramics in the Gd_2O_3 – Nb_2O_5 ternary diagram
- A7 **Euan DUNCAN** (CEMHTI – CNRS, Orléans)
A computationally-guided glass-crystallisation approach to materials discovery in the $SrO-Al_2O_3-SiO_2$ phase field
- A8-P8 **Kaoutar NACIRI** (SIMaP – CNRS, Saint-Martin-d'Hères)
Modélisation du diagramme de phases pseudo-binaire Li_2O-MoO_3
- A9-P10 **Pierre-Jean PANTEIX** (IJL – CNRS, Nancy)
Étude thermodynamique de l'influence de l'addition d'alumine Al_2O_3 dans le système $CaO-SiO_2-YO_{1,5}$
- A10-P11 **Christophe JOURNEAU** (LEAG CEA Cadarache, Saint-Paul lez Durance)
Exercice de comparaison de mesures de propriétés thermophysiques à hautes températures

 Oral Poster Oral & Poster**Intérêt du modèle régulier à 2 états pour la description des liquides unaires****Pierre BENIGNI¹**

¹ Aix Marseille Univ., Université de Toulon, CNRS, IM2NP (Institut Matériaux Microélectronique Nanosciences de Provence), UMR 7334 CNRS – Aix-Marseille Université, FST St Jérôme, Service 251, avenue Normandie-Niemen, 13397 Marseille – Cedex 20 (France)

Résumé

Le modèle idéal à 2 états est exclusivement utilisé pour décrire la phase liquide dans les développements des bases de données CALPHAD dites de 3^{ème} génération. Cependant, tous les types de liquides ne peuvent pas être décrits à l'aide d'un modèle idéal à 2 états et, pour les liquides formateurs de verres qualifiés de fragiles, un modèle régulier à 2 états semble être une solution de modélisation plus prometteuse [1]. Le formalisme et le diagramme de phases du modèle régulier seront présentés avec un accent particulier mis sur la variable pression. Ses principales caractéristiques seront illustrées à travers une étude paramétrique originale (Figure 1) et deux cas tests, le tellure et l'eau, extraits de travaux publiés dans la bibliographie. L'analyse suggère que, par rapport à son homologue idéal, le modèle régulier à 2 états peut représenter un outil de modélisation complémentaire précieux qui élargit considérablement le spectre des phénomènes pouvant être décrits. Son applicabilité dans un système multi-composant reste également à vérifier.

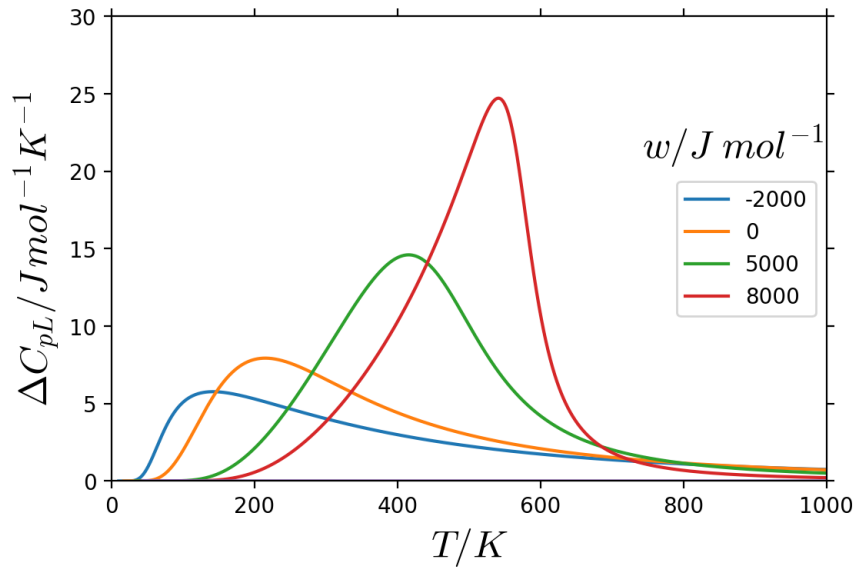


Figure 1. Evolution avec la température de la capacité thermique de configuration (ΔC_{pL}) d'un liquide unaire calculée à l'aide du modèle régulier à 2 états pour différentes valeurs du paramètre d'interaction énergétique (w) entre les 2 états. Les différences d'enthalpie et d'entropie entre les 2 états sont choisies égales à $\Delta H_d = 5000 \text{ J mol}^{-1}$ et $\Delta S_d = R$.

Références

[1] P. Benigni, Interest of the regular 2-state model for the description of unary liquids: presentation of the formalism, submitted to the CALPHAD journal, under review.

 Oral Poster Oral & Poster

Modélisation Calphad des systèmes cubiques centrées pour le stockage solide de l'hydrogène

Julien Garcia¹, Jean-Marc Joubert¹

¹Université Paris Est Créteil, CNRS, ICMPE, 2 rue Henri Dunant, 94320, Thiais

Résumé

Les alliages à haute entropie de mélange présentent de bonnes capacités d'absorption de l'hydrogène. Cependant, leurs compositions complexes engendrent une grande quantité d'alliages à étudier. La méthode CALPHAD est l'un des seuls outils de prédiction des propriétés thermodynamiques de systèmes complexes. Cette dernière est une méthode de calcul de propriétés thermodynamiques basée sur l'expression de l'énergie de Gibbs. La méthodologie consiste à décrire les phases de notre système à l'aide d'un modèle contenant des paramètres que l'on déterminera à partir de données expérimentales par la méthode des moindres carrés. Une fois l'ensemble des paramètres du modèle déterminé, il sera possible de prédire les propriétés thermodynamiques ou encore dans notre cas les propriétés d'absorptions de l'hydrogène de notre système dans des régions sans informations. Cette méthode permet également de combiner des descriptions déjà existantes afin de pouvoir extrapoler les propriétés d'alliages multi-constituants. L'objectif est ici de constituer une base de données CALPHAD contenant les descriptions de systèmes métal-hydrogènes binaires et ternaires afin de pouvoir faire des extrapolations et de prédire les capacités d'absorption de systèmes d'ordre supérieur tel que les HEA.


 Oral

 Poster

 Oral & Poster

Cocher la case souhaitée.

Thermodynamic modelling of the Mo–Pt system based on the NACEF approach.

M. Mahdi Siblani⁽¹⁾, J.-M. Fiorani⁽¹⁾, J.-M. Joubert⁽²⁾, C. Barreteau⁽²⁾, J.-C. Crivello⁽²⁾, Nicolas David⁽¹⁾, Michel Vilasi⁽¹⁾

(1) IJL/UL – Institut Jean Lamour, Université de Lorraine. BP 70239, Vandœuvre-lès-Nancy, 54506, France.

(2) Univ. Paris Est Créteil, CNRS, ICMPE, UMR 7182, 2 rue Henri Dunant, 94320 Thiais, France

Résumé

In the present work, a thermodynamic modelling of the Mo–Pt system using a combined first-principles calculations and experimental data is presented.

DFT were performed for all the end-members of the intermetallic phases (A15, DO₁₉, B19 and MoPt₂) based on a new consistent set of calculations. Results are consistent with experimental work of Ref. [1] in which enthalpies of formation measurements of A15, DO₁₉, B19, MoPt₂ and A1-(Pt) phases were obtained by direct reaction synthesis calorimetry at high temperature.

The selected phase diagram data are mainly provided by Refs. [1] and [3] which present more recent investigations on the solubility limits of the intermetallic phases of the system via Electron Probe MicroAnalysis – Wavelength Dispersive Spectrometry (EPMA – WDS) from equilibrated alloys. In order to characterize the site occupancies of the DO₁₉, B19 and MoPt₂ phases, powder X-ray diffraction (XRD) diagrams were obtained and analyzed by the Rietveld method.

The liquid, fcc, bcc and hcp phases are described by a substitutional solution model. To model the intermetallic phases (DO₁₉, B19 and MoPt₂) and the corresponding order-disorder transitions, the two-sublattice model was applied using the NACEF (New Approach to the Compound Energy Formalism) approach which is presented in details in Ref. [4]. The calculated results show a very good agreement with all the available experimental and ab initio data with a limited number of used parameters. In this sense, self-consistent thermodynamic description of the Mo-Pt system is provided.

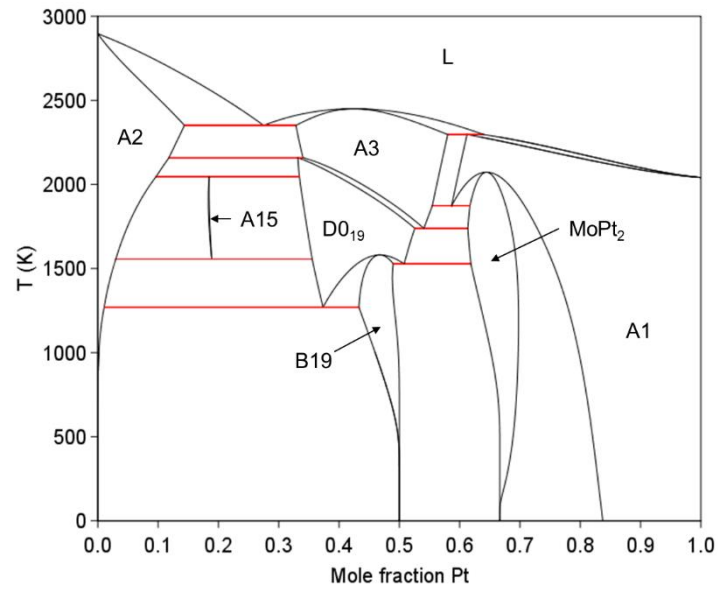


Fig. 1. The calculated Mo–Pt phase diagram from the current assessment.

Références

- [1] My.Y. Benarchid et al., *J. Chem. Thermodynamics* 41, 2009, pp. 383–385.
- [2] R. Flukiger et al., *J. Less-Common Met.* 32, 1973, pp. 207–225.
- [3] T. Benlaharache, *Etude et modélisation thermodynamique du système Mo-Pt-Si*, [Thesis], Nancy I University (France), 2008.
- [4] J.-M. Fiorani et al., *CALPHAD* Vol. 80, 2023, 102509.

 Oral Poster Oral & Poster*Cocher la case souhaitée.*

Équilibres de phases et limites de solubilité dans le système (Ce,Nd)-Fe-B pour des nouveaux aimants permanents substitués

Éloi DE VILLOUTREYS¹, Andrea QUAINI¹, Jean-Louis FLÈCHE¹, Cyril RADO², Stéphane GOSSÉ¹

¹ Université Paris-Saclay, CEA, Service de Recherche en Corrosion et Comportement des Matériaux, 91191, Gif-sur-Yvette, France

² Université Grenoble Alpes, CEA, LITEN, DTNM, 38000, Grenoble, France

Résumé

La forte demande mondiale en aimants permanents Nd-Fe-B et la criticité du Néodyme (Nd) pousse les fabricants à développer de nouveaux aimants où le Nd est partiellement remplacé par d'autres Terres Rares (TR) moins critiques comme le Cérium (Ce) ou le Lanthane (La) [1]. L'élaboration de ces nouveaux aimants substitués nécessite une maîtrise fine de la microstructure, et plus particulièrement de la distribution des phases aux joints de grains. Cette complexité nécessite le développement d'une approche numérique pour la thermodynamique de ces systèmes. L'objectif final du projet dans lequel s'inscrivent ces travaux est d'aboutir à un optimum entre une composition réduite en Nd au profit de TR non critiques et une microstructure qui garantit des performances magnétiques élevées ; c'est-à-dire un optimum entre une composition et un procédé de fabrication.

Cette étude se concentre sur l'évolution de la phase principale Nd₂Fe₁₄B et des phases de joints de grain par l'ajout de Ce au système. Certaines phases comme les phases riches en Nd sont nécessaires pour maintenir la coercitivité de l'aimant, tandis que d'autres comme FeB sont délétères pour les propriétés de l'aimant. De manière non-intuitive, la présence de la phase paramagnétique CeFe₂ peut aider à maintenir la coercitivité de l'aimant en améliorant la mouillabilité de la phase 2:14:1 [2].

Une étude expérimentale et une modélisation ont été réalisées sur le système (Ce,Nd)-Fe-B selon la méthode CALPHAD, complétées par des calculs quasi-harmoniques sur certains intermétalliques binaires. Des calculs d'application ont également été réalisés afin de proposer des premières directions de compositions pertinentes pour l'élaboration de futurs aimants substitués.

Références

- [1] G. Delette, Nd₂Fe₁₄B permanent magnets substituted with non-critical light rare earth elements (Ce, La): A review, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. 577 (2023) 170768.
 [2] Y. Zhang, T. Ma, J. Jin, J. Li, C. Wu, B. Shen, M. Yan, Effects of REFe₂ on microstructure and magnetic properties of Nd-Ce-Fe-B sintered magnets, *Acta Materialia*. 128 (2017) 22–30.

 Oral Poster Oral & Poster*Cocher la case souhaitée.*

**APPROCHE THERMODYNAMIQUE DE LA CRISTALLISATION DE LA PEROVSKITE
THERMOCHROME SmNiO_3 A PARTIR DE LA PHASE AMORPHE**

Silvère Barrat, Zil Fernández-Gutiérrez, Stéphanie Bruyère, Carlos Calvo-Mola, David Pilloud, Fabien Capon

*Institut Jean Lamour UMR 7198, Campus Artem – 2 allée André Guinier, BP 50840
54011 Nancy Cedex*

Résumé

SmNiO_3 (SNO) est une perovskite thermochrome particulièrement intéressante dans le domaine de la régulation thermique car son émissivité varie fortement à une température de transition (TMI) proche de 120°C ; température au-delà de laquelle elle réfléchit la lumière solaire et protège le capteur solaire et son fluide caloporteur d'une surchauffe éventuelle. Elle est donc actuellement développée sous la forme de films minces cristallisés de quelques dizaines de nanomètres déposés sur des substrats de capteurs solaires. Ces revêtements sont délicats à obtenir compte tenu de leur caractère métastable par rapport aux phases oxydes correspondantes (NiO et Sm_2O_3) et du fait d'un rayon faible de la terre rare Sm qui déstabilise le degré +3 du nickel indispensable à l'effet thermochrome.

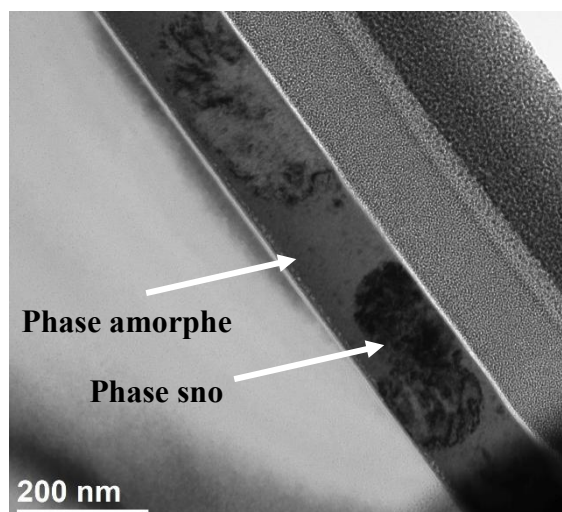


Figure 1 : micrographie MET de cristallites de SNO dans la matrice amorphe Sm-Ni-O (recuit pendant 5 min à $T^0=500^\circ\text{C}$ sous air)

La synthèse d'un film amorphe Sm-Ni-O par pulvérisation cathodique magnétron sur substrat Si, suivie d'un recuit de cristallisation sous air permet de former des cristallites thermochromes SNO dans des conditions de température et de pression tout à fait raisonnables [1] comme le montre la micrographie MET en champ clair figure 1. L'objectif ici est de simuler la vitesse de germination ${}_{sno}^v I$ en utilisant la théorie capillaire de Volmer appliquée aux transformations en phase solide selon Becker et Döring et repris par J.W. Christian [2] :

$${}_{sno}^v I = N_{emb}^* \cdot S_{emb}^* \cdot N_{a \rightarrow p} \cdot \Gamma_{a \rightarrow p}^*$$

Cette vitesse dépend entre autres, du nombre d'embryons de phase cristallisée atteignant le rayon critique (N_{emb}^*) ainsi que de la fréquence de saut $\Gamma_{a \rightarrow p}^*$ des atomes de la phase mère amorphe (a) intégrant la phase cristallisée fille SNO (p). Le développement de cette relation générale est proposé via l'écriture de la fonction caractéristique \mathcal{G} (fonction \mathcal{G} différente de l'énergie de Gibbs G) dont la variation lors de la croissance d'un embryon de SNO (dV^{sno}) s'écrit de façon générale sans hypothèse simplificatrice :

$$d\mathcal{G} = (\sigma^0 - \sigma^{asno})dV + (\sigma^{asno} - \sigma^{sno})dV^{sno} + \gamma^{sno}dA + (T^{asno} - T^0)dS^{asno} + (T^{sno} - T^0)dS^{sno} + (\mu^{sno} - \mu^{asno})dn^{sno} - \frac{4}{3}\kappa^{asno} \frac{(\Delta V_m)^2}{(V_m^{asno})^3} dV^{sno}$$

Cette relation tient compte du caractère hétérogène de la germination (aux interfaces entre le film et le substrat), des contraintes mécaniques engendrées par le formation de la phase cristallisée dans la phase amorphe (dernier terme) et des éventuelles hétérogénéités de températures et de contraintes mécaniques entre les phases en présence. Le tracé de ${}_{sno}^v I$ en fonction de la température est reporté figure 2 où l'on note un maximum de la vitesse de cristallisation pour une température proche de 790 K, valeur très proche de la température de recuit optimale obtenue expérimentalement par diffraction des rayons X [1].

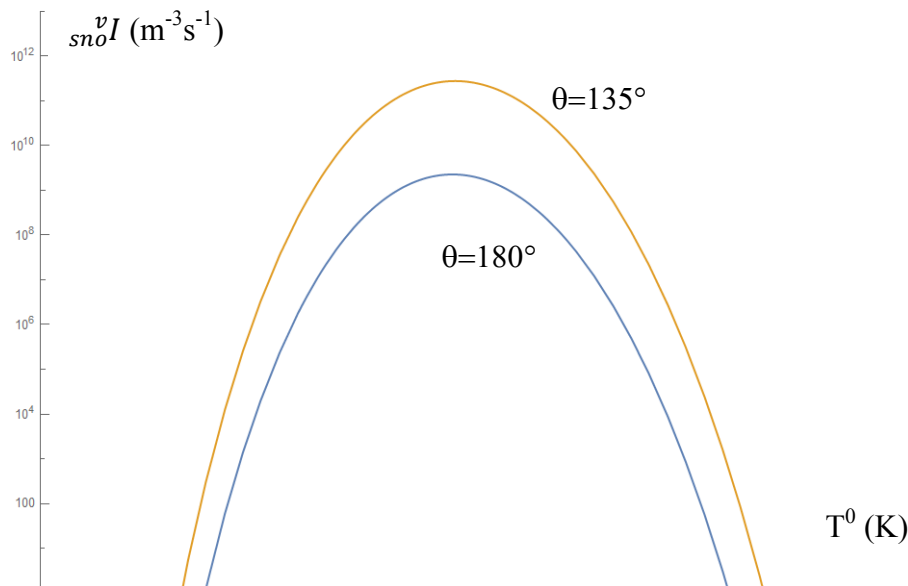


Figure 2 : évolution de ${}_{sno}^v I$ en fonction de la température de recuit sous air pour deux angles de mouillage θ lorsque la germination est homogène ($\theta=180^\circ$) et hétérogène ($\theta=135^\circ$)

Références

- [1] Z. Fernandez-Gutiérrez, S. Bruyère, D. Pilloud, E. Haye, G. Medjahdi, S. Barrat, F. Capon "Thermo-kinetic approach to the crystallization mechanism of thermochromic SmNiO₃ thin films: an in situ study in air-annealing", Journal of alloys and Compounds, 960 (2023) 170799.
 [2] J.W. Christian "The theory of transformations in metals and alloys", Chapter 10 "The classical theory of nucleation" p.422. Pergamon Third edition 2002.

 Oral Poster Oral & Poster

Étude expérimentale et évaluation thermodynamique des systèmes constitutifs du système Cr–Fe–Mo–Ti

Agustin FLORES^{1,2}, Paul FOSSATI¹, Sylvie CHATAIN¹, Jean-Marc JOUBERT²

¹ Université Paris-Saclay, CEA, Service de la Corrosion et du Comportement des Matériaux dans leur Environnement, 91191, Gif-sur-Yvette, France

² Université Paris-Est Créteil, ICMPE, 2-8 rue Henry Dunant, Thiais, France

Résumé

Des revêtements durs résistants à l'usure à base de cobalt ont fait l'objet de recherches depuis des années dans les applications nucléaires. Ce cobalt peut être activé par capture neutronique et constitue alors une grande partie des déchets radioactifs du circuit primaire des réacteurs nucléaires. Il est donc important d'étudier des revêtements alternatifs sans cobalt. À ce jour, bien qu'il n'existe pas d'alliage capable de résister à l'abrasion et à la corrosion à 350°C et 150bar de pression pendant des longs cycles, des alliages concentrés complexes constitués de Cr–Fe–Mo–Ni–Ti ont montré des propriétés prometteuses [1].

La méthode Calphad (calculation of phase diagram) a été choisie pour échantillonner l'espace de composition et déterminer les compositions les plus intéressantes de ce système. Pour cela, une évaluation critique de tous les sous-systèmes constitutifs a été réalisée. Comme ce système présente plusieurs phases de Frank-Kasper (σ , μ , χ , R, Laves), les modèles ont été discutés et choisis en fonction de la structure cristalline. La stabilité du réseau (lattice stability) et l'enthalpie de formation des composés stables et métastables ont été calculées par DFT (density functional theory). Nous avons constaté que certains systèmes manquent de données fiables ou que des contradictions existent parmi différentes études. Par conséquent, nous avons déterminé expérimentalement les équilibres de phase des systèmes Cr–Ti et Cr–Mo–Ti.

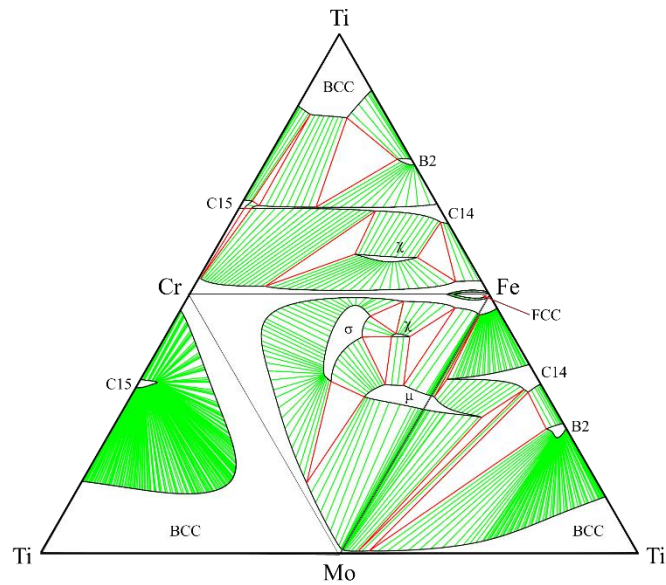


Figure 1 – Section isotherme à 1000°C du système quaternaire Cr–Fe–Mo–Ti.

Finalement, nous avons effectué un criblage des alliages et sélectionné certains d'entre eux pour une utilisation comme revêtements résistants à l'usure et à la corrosion. La prédiction des phases ainsi que leurs propriétés restent à vérifier.

Références

[1] G. Huser et Al, Procedia CIRP, Vol. 94, (2020), 270-275.

 Oral Poster Oral & Poster

ESTIMATION DES C_p DE COMPOSES A BASE D'ALUMINIUM EN UTILISANT L'APPROCHE DE NEUMANN-KOPP (NK), UNE APPROCHE NK INVERSE ET UNE APPROCHE NK MODIFIEE

Jean-Marc JOUBERT¹, Bartek KAPLAN², Malin SELLEBY²

¹ICMPE, CNRS, 2 rue Henri Dunant, 94320 Thiais

²KTH, Stockholm, Suède

Résumé

Dans la base de données SGTE, le C_p de l'aluminium *fcc* est défini au-dessous et au-dessus du point de fusion. Au-dessus du point de fusion, on utilise l'extrapolation SGTE [1,2], caractérisée par une convergence du C_p du solide vers celui de la phase liquide. Il en résulte une anomalie sur la courbe de C_p . Pour la modélisation des composés intermétalliques dans l'approche Calphad, en l'absence de données de C_p expérimentales ou calculées, la règle de Neumann-Kopp (NK) est souvent utilisée. Elle consiste à estimer le C_p par une moyenne des C_p des éléments constitutifs. En raison de l'extrapolation SGTE, les C_p calculés des composés à base d'aluminium modélisés avec la règle de NK présentent toujours une anomalie au point de fusion de l'aluminium, ce qui n'est absolument pas physique. Cela souligne la nécessité de définir le C_p de l'aluminium *fcc* pur au-dessus de son point de fusion. Cela a été fait par exemple en utilisant des données DFT calculées [3]. Dans le présent travail, la possibilité d'utiliser des données expérimentales par le biais d'une approche NK inverse est étudiée. Les données expérimentales disponibles sur la chaleur spécifique des composés binaires d'aluminium Al-B ont été systématiquement examinées dans la littérature. À partir de la connaissance du C_p de l'élément B et de la composition du composé, il est possible de déduire un C_p effectif pour l'aluminium en utilisant la règle de NK inverse. Les résultats seront présentés et l'efficacité de cette approche sera discutée, en comparaison avec la possibilité d'utiliser une approche NK modifiée.

Références

- [1] A. Fernández Guillermet, Int. J. Thermophys., 6 (4) (1985) 367-393.
- [2] J.-O. Andersson et al., Calphad, 11 (1) (1987) 93-98.
- [3] S. Bigdeli et al., Calphad, 65 (2019) 79-85.

 Oral Poster Oral & Poster**TITRE : Modélisation du diagramme de phases pseudo-binaire $\text{Li}_2\text{O}-\text{MoO}_3$**

**Kaoutar NACIRI¹, Guillaume DEFFRENNES¹, Christian CHANTILLON¹, Alexander PISCH¹,
Ioana NUTA¹, Matias VELAZQUEZ¹,**

¹ Univ. Grenoble Alpes, CNRS, Grenoble INP, SIMAP, F-38000 Grenoble, France

Résumé

La haute pureté des cristaux est la qualité essentielle pour les utiliser dans les bolomètres cryogéniques à chaleur-scintillation (BCCS). Précisément, il est important d'éliminer toute radio-impureté (K, Th, U...) qui peut impacter les résultats des signaux (e.g. le bruit de fond dans la recherche de double décroissance bêta sans neutrino ($0\nu 2\beta$)).

Les cristaux de Li_2MoO_4 (LMO) sont prometteurs pour ces applications. Leurs propriétés mécaniques, structurales et physicochimiques ont été étudiées expérimentalement par plusieurs auteurs. Cependant, une étude récente [1] soulève des interrogations sur les diagrammes de phases des systèmes Li-Mo-O-X (X=K, Th, U), en particulier en ce qui concerne le coefficient de partage (k_0) des impuretés dans LMO qu'il est important de connaître pour la purification des cristaux.

Les études antérieures de la section $\text{Li}_2\text{O}-\text{MoO}_3$ mentionnent la présence de molybdates ternaires Li_4MoO_5 , Li_2MoO_4 , $\text{Li}_2\text{Mo}_2\text{O}_7$, $\text{Li}_4\text{Mo}_5\text{O}_{17}$, $\text{Li}_2\text{Mo}_3\text{O}_{10}$ et $\text{Li}_2\text{Mo}_4\text{O}_{13}$. Cependant, la congruence ou l'incongruence de certaines composées et la stabilité de $\text{Li}_2\text{Mo}_2\text{O}_7$ et $\text{Li}_2\text{Mo}_3\text{O}_{10}$ dans la section sont débattues [2].

Dans notre travail, une modélisation thermodynamique de la section $\text{Li}_2\text{O}-\text{MoO}_3$ a été réalisée dans l'optique de décrire des systèmes Li-Mo-O-X (X=K, Th, U). L'énergie de Gibbs des composés Li_2MoO_4 , $\text{Li}_4\text{Mo}_5\text{O}_{17}$ et $\text{Li}_2\text{Mo}_4\text{O}_{13}$ ainsi que du liquide sont optimisées sur la base de notre revue des données thermodynamiques et relatives aux équilibres entre phases disponibles dans la section. Des premiers résultats et des perspectives seront présentés.

Références

- [1] Velázquez, M., et al., Exploratory growth in the $\text{Li}_2\text{MoO}_4-\text{MoO}_3$ system for the next crystal generation of heat-scintillation cryogenic bolometers. *Solid State Sciences*, 2017. 65: p. 41-51
- [2] Moser, M., et al., Re-determination of the pseudobinary system $\text{Li}_2\text{O} - \text{MoO}_3$. *Crystal Research and Technology*, 2008. 43(4): p. 350-354.



<input checked="" type="checkbox"/> Oral	<input type="checkbox"/> Poster	<input type="checkbox"/> Oral & Poster
Système B-C-Si : modélisation thermodynamique pour la croissance par CVD de B_xC sur 4H-SiC		
Y. Benamra, J. Andrieux, B. Gardiola, O. Dezellus, F. Cauwet, L. Auvray, G. Ferro <i>LMI, UMR CNRS 5615, Université Claude Bernard Lyon 1, F-69622 Villeurbanne, France.</i>		

Résumé

Le carbure de bore (B_xC), est une céramique semiconductrice aux propriétés électroniques (gap, mobilités des porteurs...) encore mal connues en raison des difficultés pour l'élaborer sous forme monocristalline (massive ou en couches minces). Pour investiguer sa croissance hétéroépitaxiale, prérequis à la caractérisation de ses propriétés électroniques fondamentales, nous avons sélectionné le 4H SiC (0001) 4° off comme substrat pour sa compatibilité chimique et cristallographique avec B_xC. La croissance des couches de B_xC a été réalisée par dépôt chimique en phase vapeur (CVD) à haute température 1200-1600°C, en utilisant le système chimique BCl₃+C₃H₈+H₂.

Nous avons voulu soutenir cette étude expérimentale de croissance hétéroépitaxiale de B_xC sur 4H-SiC par la modélisation thermodynamique des équilibres entre phases du système B-C-Si, en se basant sur la méthode CALPHAD.

La base de données thermodynamiques (BDD) du système B-C-Si, issue de données de la littérature [1], a été confrontée aux résultats obtenus pour un couple de diffusion B-SiC traité à 1700 °C pendant 8 heures. Le chemin de diffusion identifié avec ce couple est SiC / B_xC / SiB₆ / SiBn ÷ Bss, avec une solubilité de Si dans B_xC mesurée à 1,78-2,18 % at. de Si. Cette BDD, étendue à la phase gaz, a permis par exemple la détermination de diagrammes de dépôt que nous avons comparés aux résultats expérimentaux issus de la CVD.

La discussion portera sur les limitations de la BDD existante du système B-C-Si et sur l'apport de la modélisation thermodynamique pour la compréhension du procédé de CVD de B_xC sur SiC.

Références

[1] H. M., Chen, Journal of Alloys and Compounds, 481, 1- 2, (2009), 182- 189.

 Oral Poster Oral & Poster

Etude thermodynamique de l'influence de l'addition d'alumine Al_2O_3 dans le système $CaO-SiO_2-YO_{1,5}$

Justine BONNAL¹, Sofiane MERMOUL¹, Carine PETITJEAN¹, Pierre-Jean PANTEIX¹, David BONINA¹, Christine GENDARME¹, Simon ARNAL², Michel VILASI¹

¹ Université de Lorraine, CNRS, IJL, F-54000 Nancy, France

² Safran Ceramics, 33700 Mérignac, France

La réduction de l'impact environnemental des moteurs aéronautiques passe par l'augmentation de leur température de fonctionnement. Dans cet objectif, les matériaux composites à matrice céramique (CMC) sont envisagés comme substitut aux superalliages de nickel pour des pièces telles que les aubes de turbine. Des barrières environnementales (EBC) sont cependant nécessaires pour protéger les CMC contre la dégradation par les produits de combustion. Pour cette application, les silicates de terres rares sont considérés comme étant de bons candidats. Le développement des EBC est aujourd'hui limité par la corrosion due aux interactions avec des particules ingérées par le moteur en vol (sables, poussières, cendres) et constituées d'aluminosilicates de calcium et magnésium (CMAS). Aux températures de fonctionnement, ces particules passent à l'état liquide et s'infiltrent dans le revêtement, provoquant des dégradations thermomécaniques et thermochimiques. Ces dernières sont dues à la dissolution du silicate de terres rares dans le liquide silicaté et à la précipitation de nouvelles phases. Il est donc nécessaire d'étudier la réactivité entre l'EBC et le CMAS afin de prédire la durée de vie du système. Des données thermodynamiques et cinétiques sont disponibles dans la littérature [1,2] mais doivent être complétées, notamment aux températures d'intérêt.

Du fait du très large domaine de composition des CMAS, un système modèle simplifié peut être utilisé pour avoir une meilleure compréhension des phénomènes thermochimiques mis en jeu. L'interaction entre les céramiques et les CMAS peut amener à la précipitation de phases telles que l'apatite $Ca_2RE_8(SiO_4)_6O_2$ et le cyclosilicate $Ca_3RE_2(Si_3O_9)_2$ dont le caractère potentiellement couvrant pourrait fournir une protection pour l'EBC. La stabilité de ces phases dépend d'un grand nombre de paramètres. Dans l'étude proposée ici, l'influence de l'addition d'alumine Al_2O_3 dans le système ternaire $CaO-SiO_2-YO_{1,5}$ est abordée afin d'identifier l'étendue du domaine liquide à 1300°C et de déterminer la stabilité thermodynamique des phases présentes à l'équilibre.

Références

- [1] D. L. Poerschke, T. L. Barth, O. Fabrichnaya, C. G. Levi, Journal of the European Ceramic Society, 36 (2016) 1743-1754
 [2] F. Perrudin, C. Rio, M. H. Vidal-Setif, C. Petitjean, P. J. Panteix, M. Vilasi, Journal of the European Ceramic Society, 37 (2017) 2657-2665


 Oral

 Poster

 Oral & Poster

MESURES EXPÉRIMENTALES DE PROPRIÉTÉS THERMOPHYSIQUES DU CORIUM ET DE SES COMPOSANTS LIQUIDES À HAUTE TEMPÉRATURE

Caroline DENIER¹, Jules DELACROIX¹, Pascal PILUSO¹, Emmanuel DE BILBAO²

¹CEA, DES, IRESNE, DTN, Laboratoire d'études et d'expérimentation pour les accidents graves, Cadarache, F-13108 St-Paul-lez-Durance, France

²CNRS, CEMHTI UPR 3079, Univ. Orléans, 45071, Orléans, France

Résumé

Durant un accident grave de réacteur nucléaire, l'élévation importante de la température ($T > 2000$ °C) mène à la fusion du combustible et à la formation d'un mélange complexe nommé « corium ». Lors du déroulé de l'accident grave, de nombreux phénomènes multi-physiques couplés sont impliqués. Les propriétés thermophysiques du corium sont ainsi d'une grande importance dans tous les phénomènes accidents graves mais leur connaissance n'est que partielle à ce jour. Afin de réduire les incertitudes dans les codes accidents graves utilisés pour la simulation, la connaissance fiable des propriétés du corium est nécessaire [1].

Les données fiables existantes sur les propriétés thermophysiques du corium et de ses composants sont rares étant donné la difficulté de réalisation des mesures à haute température. Par exemple, pour la tension de surface, des données sont disponibles pour le zirconium pur mais très peu pour les mélanges corium $U_{1-x}Zr_xO_{2-y}$. Les méthodes traditionnelles, avec contact, doivent être adaptées et posent des problèmes de compatibilité chimique entre les matériaux, tandis que des instabilités et la vaporisation des échantillons peuvent se produire avec des méthodes de mesure par lévitation. En raison des hautes températures en jeu, la composition de l'échantillon peut être modifiée durant les essais suite à une vaporisation partielle ou d'une réaction avec l'environnement.

L'obtention de mesures fiables de propriétés thermophysiques du corium nécessite donc l'utilisation de différents dispositifs expérimentaux de manière complémentaire. Dans ce travail, deux méthodes ont été retenues : la lévitation aérodynamique (ADL) [2-4] et la pression maximale de bulle (MBP) [5, 6]. Le dispositif d'ADL présent au CEMHTI, CNRS Orléans, a permis d'atteindre les températures élevées nécessaires à l'obtention de propriétés de la zircone (ZrO_2) liquide, sa

température de fusion étant de 2715 °C. En complément, le dispositif MBP présent au CEA Cadarache a permis la réalisation de mesures de propriétés de coriums prototypiques (U-O-Zr), contenant du dioxyde d'uranium appauvri. Les dispositifs expérimentaux employés sont détaillés, ainsi que les adaptations qui y ont été apportées afin d'obtenir ces mesures de propriétés thermophysiques à haute température, nécessaires aux études accidents graves et à l'amélioration de la sûreté nucléaire.

Références

- [1] TCOFF-1, Thermodynamic Characterization of Fuel Debris and Fission Products Based on Scenario Analysis of Severe Accident Progression at Fukushima Daiichi Nuclear Power Station, NEA, 2021.
- [2] D. Langstaff, M. Gunn, G. N. Greaves, A. Marsing, and F. Kargl, "Aerodynamic levitator furnace for measuring thermophysical properties of refractory liquids," *Review of Scientific Instruments*, vol. 84, no. 12, p. 124901, 2013.
- [3] D. L. Price, *High-Temperature Levitated Materials*, Cambridge University Press. 2010.
- [4] B. Glorieux, F. Millot, and J. C. Rifflet, "Surface Tension of Liquid Alumina from Contactless Techniques," *International Journal of Thermophysics*, vol. 23, no. 5, pp. 1249–1257, 2002.
- [5] J. A. Cahill and A. D. Kirshenbaum, "The surface tension of liquid uranium from its melting point, 1406°K to 1850°K," *Journal of Inorganic and Nuclear Chemistry*, vol. 27, no. 1, pp. 73–76, 1965.
- [6] N. Chikhi, J. Delacroix, P. Fouquart, and B. Turquais, "Measurement of corium surface tension using the maximum bubble pressure," *Nuclear Engineering and Design*, vol. 379, p. 111266, 2021.

 Oral Poster Oral & Poster*Cocher la case souhaitée.***Liquidus à très faible concentration : mesure et modélisation (exemple de Mg-Fe)****Mathias Desseaux¹, Bruno Gardiola¹, Jérôme Andrieux¹, Christophe Le Bourlot², Sébastien Jaud¹,
Rainer Schmid-Fetzer³, Olivier Dezellus¹**¹ LMI, UMR CNRS 5615, Université Claude Bernard Lyon 1, F-69622 Villeurbanne, France.² MATEIS, UMR CNRS 5510, INSA-Lyon, Univ Lyon, F-69621 Villeurbanne, France³ Institute of Metallurgy, Clausthal University of Technology, Robert-Koch-Str. 42, D-38678 Clausthal-Zellerfeld, Germany**Résumé**

Dans le cas d'un liquidus à forte pente, la détermination de sa température est difficile car entachée d'une forte incertitude et il est alors souvent plus commode de déterminer la composition du liquide saturé. Dans les cas où cette saturation est faible, voire très faible, il est nécessaire d'utiliser des techniques expérimentales très spécifiques comme le prélèvement de liquide [1]. Pour certains liquides, oxydables et volatiles, ces techniques sont toutefois impossibles car il est alors nécessaire de travailler dans un creuset scellé ou très hermétique.

La situation décrite ci-dessus est typiquement celle de plusieurs systèmes impliquant le magnésium (Mg) comme par exemple Mg-Fe, Mg-Cr, Mg-Mn, Mg-Zr, etc. Une nouvelle méthodologie a été développée pour l'étude de ces liquidus à forte pente et faible concentration qui sera exposée sur le cas du liquidus Mg-Fe.

Du point de vue de la modélisation Calphad, ces systèmes à faible solubilité mutuelle posent également des difficultés : tout d'abord en raison du nombre de données très restreinte, mais aussi en raison des modèles d'interactions classiquement utilisés (polynômes de Redlich-Kister par exemple) qui conduisent à des extrapolations parfois douteuses à haute température. Nous montrerons sur l'exemple de Mg-Fe que dans le cas d'une modélisation intégrant la variable pression, il est impératif d'assurer une modélisation Calphad la plus physique possible, en intégrant notamment une fonction permettant au liquide de tendre vers l'idéalité à haute température [2].

Références

[1] Dezellus O., Gardiola B., Andrieux J.; Journal of Phase Equilibria and Diffusion, vol. 35 (2), 120-126 (2014)

[2] Liang S.M., Wang P., Schmid-Fetzer R., Calphad, vol. 54, 82-96 (2016)

 Oral Poster Oral & Poster*Cocher la case souhaitée.*

Mesure de la capacité thermique massique d'un échantillon d'alumine à haute température par calorimétrie à chute.

Refat RAZOUK¹, Olivier BEAUMONT¹, Jacques HAMEURY¹, Bruno HAY¹

¹ *Laboratoire National de Métrologie et d'Essais, Laboratoire Commun de Métrologie (LNE-CNAM),
29, avenue Roger Hennequin
78197 Trappes Cedex
France.
E-mail : refat.razouk@lne.fr*

Résumé

Dans le cadre de l'exercice d'inter-comparaison organisé par la Société Française de Thermique (SFT), le LNE a exploité un banc de mesure, par calorimétrie à chute, de la capacité thermique massique des matériaux à très hautes températures afin mesurer la capacité thermique massique d'un échantillon d'alumine fournit par le CEA.

Cette communication décrit brièvement le moyen utilisé ainsi que les procédures d'étalonnage et de mesure mises en œuvre[1]. Le protocole expérimental et les résultats de mesures obtenus sur la gamme de température 750 °C jusqu'à 1750 °C sont présentés et discutés ainsi que la suite de l'exercice.

Mots clés : calorimétrie, capacité thermique massique, haute température, métrologie.

Références

- [1] R. Razouk, O. Beaumont, J. Hameury, B. Hay, Towards accurate measurements of specific heat of solids by drop calorimetry up to 3000 °C, *Therm. Sci. Eng. Prog.* 26 (2021) 101130.
<https://doi.org/10.1016/j.tsep.2021.101130>.

 Oral Poster Oral & Poster

Cocher la case souhaitée.

PHASE GAZEUSE de K₂TaF₇

Ioana NUTA*¹, Miroslav BOCA², Christian CHATILLON¹, Catherine BESSADA³,
 1Univ. Grenoble Alpes, CNRS, Grenoble INP, SIMaP, F-38000 Grenoble, France
 2Institute of Inorganic Chemistry, Slovak Academy of Sciences, Dúbravská cesta 9,
 845 36 Bratislava, Slovakia
 3.CNRS CEMHTI F-45000 Orleans, France

* Corresponding author: Ioana Nuta, Tel.: +33 476826511;
 E-mail address: ioana.nuta@grenoble-inp.fr

Résumé

Le composé K₂TaF₇ est du difluorure de tétrahydroxyde de potassium, souvent utilisé comme matériau dans l'industrie chimique et en recherche. Il est utilisé en cristallographie aux rayons X et en spectrométrie pour ses propriétés cristallines. Il est souvent utilisé pour fabriquer des cristaux qui servent à analyser et à diffuser la lumière X pour l'étude des structures cristallines de différentes substances. Le K₂TaF₇ dopé avec des ions de terres rares (tels que le néodyme ou le praséodyme) est utilisé dans la fabrication de matériaux luminescents. Ces matériaux trouvent des applications dans les lasers, les dispositifs d'affichage, et d'autres technologies optiques. En recherche chimique, le K₂TaF₇ est parfois utilisé comme réactif ou matériau de départ pour la synthèse de composés chimiques complexes et il peut également être utilisé en catalyse, bien que ce soit moins courant. Il est important de noter que le K₂TaF₇ est un composé chimique spécifique dont les utilisations varient en fonction de ses propriétés particulières et de la manière dont il est manipulé ou modifié. Les connaissances sur ce composé ont été enrichies depuis la description du diagramme de phase des systèmes KF-K₂TaF₇[3] et K₂TaF₇-TaF₅[4], ainsi que de ses propriétés structurales[5], thermiques[6, 7] et optiques[8]. Malgré le grand nombre d'études consacrées au K₂TaF₇, aucune donnée expérimentale sur sa phase gazeuse n'est disponible. Nous avons utilisé la méthode d'effusion de Knudsen pour mesurer la pression vapeurs de ce composé et de retrouver les proportions de espèces gazeuses prédite par la littérature.

Références

- [1.] Agulyansky, A., *Chemistry of tantalum and niobium fluoride compounds*. 2004: Elsevier.
- [2.] Agulyansky, A., *Potassium fluorotantalate in solid, dissolved and molten conditions*. Journal of Fluorine Chemistry, 2003. **123**(2): p. 155-161.
- [3.] Boča, M., et al., *Phase diagrams of the KF-K₂TaF₇ and KF-Ta₂O₅ systems*. Journal of thermal analysis and calorimetry, 2007. **90**(1): p. 159-165.
- [4.] Kubikova, B., M. Boca, and M. Gaune-Escard, *Phases of the K₂TaF₇-TaF₅ binary system*. Monatshefte für Chemie - Chemical Monthly, 2008. **139**(6): p. 587-590.
- [5.] Langer, V., L. Smrcok, and M. Boca, *Dipotassium heptafluorotantalate(V), [beta]-K₂TaF₇, at 509 K*. Acta Crystallographica Section E, 2006. **62**(4): p. i91-i93.

- [6.] Kosa, L., et al., *Phase transitions of K₂TaF₇ within 680–800° C.* Open Chemistry, 2008. **6**(1): p. 27-32.
- [7.] Mlynáriková, J., et al., *Volume properties of the molten systems MF–K₂TaF₇ (MF= LiF, NaF and KF).* Journal of Thermal Analysis and Calorimetry, 2017. **129**(1): p. 475-486.
- [8.] Mel'nikova, S.V., et al., *Optical and calorimetric studies of K₂TaF₇.* Journal of Fluorine Chemistry, 2019. **222**: p. 75-80.

 Oral Poster Oral & Poster

Couplage de méthodes numériques et expérimentales appliquées à la conception d'alliages de titane pour applications à haute température

Nicolas JOBIT¹, Thomas VAUBOIS¹, Edern MENU¹, Jérôme DELFOSSE¹

¹ Safran Tech – Pôle Matériaux et procédés – 1 rue des Jeunes Bois – 78772 Magny-Les-Hameaux

Résumé

La réduction des émissions polluantes constitue un enjeu stratégique majeur pour l'industrie aéronautique. Les matériaux contribuent grandement au développement de solutions innovantes pour une aviation plus « verte ». Les besoins actuels clairement identifiés sont l'augmentation des propriétés en température des matériaux et la réduction de la masse totale de l'aéronef. Dans le domaine des matériaux métalliques, les alliages de titane présentent une excellente résistance mécanique spécifique et une bonne résistance à la corrosion qui les rendent particulièrement compétitifs face aux aciers et aux superalliages base nickel jusqu'à des températures de l'ordre de 550 °C. Ils sont ainsi employés dans les turbines à gaz notamment pour la fabrication d'aubes et de disques de compresseurs. Les nouvelles architectures moteurs impliquent cependant une augmentation de leurs températures de fonctionnement. Un des axes de recherche actuels pour le groupe SAFRAN porte donc sur l'amélioration de la tenue en température des alliages de titane.

Les alliages de titane traditionnellement utilisés à haute température sont des alliages de la catégorie « quasi- α » tels que l'alliage Ti-6242. Le centre de recherche Safran Tech porte des activités de conception numérique d'alliages basées notamment sur la thermodynamique prédictive, que ce soit dans le cadre de projets de recherches collaboratifs comme l'ANR Altitude [1,2] ou bien dans le cadre de travaux internes.

Les travaux présentés portent sur le couplage entre de la thermodynamique prédictive et une phase de validation expérimentale à petite échelle permettant de confirmer les données obtenues par la simulation tout en étudiant le potentiel des alliages sélectionnés, notamment sur le plan mécanique.

Références

[1] Projet-ANR-18-CE08-0024 (nouvel ALLiage de Titane haute temperaTure pour applications aéronautiques de DEmain | ANR)

[2] ANR Altitude – Conception d'alliages haute température, Journées Technologiques Titane 10-11 Octobre 2023


 Oral

 Poster

 Oral & Poster

Development and application of a Rapid Scan technique for emissivity measurements of cooled down molten materials

Ilse Maria ERMINI^{1,2}, Lionel COSSON¹, Franck FAYON¹, Iñigo GONZALEZ DE ARRIETA^{1,3}, Olivier ROZENBAUM¹, Pierrick VESPA⁴ and Domingos DE SOUSA MENESES¹

¹CNRS, CEMHTI UPR3079, Univ. Orléans, F-45071 Orléans, France

²LABORATOIRE COMMUN CANOPEE, CNRS/Université de Lorraine/Saint-Gobain, France

³Physics Department, University of the Basque Country (UPV/EHU), E-48940 Leioa, Spain

⁴LSFC, UMR 3080 CNRS/Saint-Gobain CREE, Saint-Gobain Research Provence, 550 avenue Alphonse Jauffret, Cavailon, France

Résumé

The real-time observation of molten materials and their cooling to solid state is of importance for many industrial processes. In this work, we describe additional possibilities obtained by the implementation of a Rapid Scan technique on a FT-IR emissometer designed to allow the observation of materials under extreme temperature conditions. The possibility of following liquid to solid-state phase transition mechanisms through time-resolved emissivity will be illustrated. This new methodology presents interesting possibilities to be employed in the study of structural transformations through the real-time monitoring of the dielectric function and true sample temperature from the experimental emissivity spectra acquired every 50 ms under free-cooling conditions.

Références

1. Ulrich, J.; Froberg, P. Problems, potentials and future of industrial crystallization. *Front Chem Sci Eng* **2013**, 7, 1-8.
2. Hennet, L. et al. Application of time resolved x-ray diffraction to study the solidification of glass-forming melts. *High Temp.-High Press* **2011**, 40, 263–270.
3. Florian, P. et al. A time resolved ²⁷Al NMR study of the cooling process of liquid alumina from 2450 °C to crystallization. *Solid State Nucl Magn Reson* **1995**, 5, 233-238, [https://doi.org/10.1016/0926-2040\(95\)01188-X](https://doi.org/10.1016/0926-2040(95)01188-X).
4. Kühnel, M. et al. Time-resolved study of crystallization in deeply cooled liquid parahydrogen. *Phys. Rev. Lett* **2011**, 106, 24: 245301. doi:10.1103/PhysRevLett.106.245301
5. Saghiri, K.A. et al. Transparency through Structural Disorder: A New Concept for Innovative Transparent Ceramics. *Chem. Mat.* **2015**, 27, 508-514. doi:[10.1021/cm5037106](https://doi.org/10.1021/cm5037106)

6. Ermini, I.M. et al. Real time FT-IR observation of materials during their cooling from molten state. *Infrared Phys. Technol.* **2022**, 127, 104424. doi:[10.1016/j.infrared.2022.104424](https://doi.org/10.1016/j.infrared.2022.104424)
7. Rousseau, B. et al. Temperature measurement: Christiansen wavelength and blackbody reference. *Int. J. Thermophys.* **2005**, 26, 1277-1286. doi:[10.1007/s10765-005-6726-4](https://doi.org/10.1007/s10765-005-6726-4)
8. Gradys, A. et al. Crystallization of polypropylene at various cooling rates. *Mater. Sci. Eng.:A.* **2005**, 442-446. doi:10.1016/j.msea.2005.08.167
9. Carpenter, M. A. Equilibrium thermodynamics of Al/Si ordering in anorthite. *Phys. Chem. Miner.* **1992**, 19 (1), 1-24.
10. Benna, P.; Tribaudino, M.; Bruno, E. Al-Si ordering in Sr-feldspar $\text{SrAl}_2\text{Si}_2\text{O}_8$ – IR, TEM and single-crystal XRD evidences. *Phys. Chem. Miner.* **1995**, 22 (6), 343-350.
11. Mabrouk, A. et al. Effects of boron on structure of lanthanum and sodium aluminoborosilicate glasses studied by X-ray diffraction, transmission electron microscopy and infrared spectrometry. *J. Non-Cryst. Solids.* **2019**, 503–504, 69-77. doi:[10.1016/j.jnoncrysol.2018.09.030](https://doi.org/10.1016/j.jnoncrysol.2018.09.030)
12. Lowenstein W. The distribution of aluminum in the tetrahedra of silicates and aluminates. *Am. Mineral.* **1954**, 39, 92.



Oral

Poster

Oral & Poster

Cocher la case souhaitée.

Exercice de comparaison de mesures de propriétés thermophysiques à hautes températures

Christophe JOURNEAU¹, Jules DELACROIX¹, Mickaël COURTOIS², Philippe LEMASSON²

¹ CEA, CEA, DES, IRESNE, DTN, Cadarache, F-13108 Saint-Paul-lez-Durance, France

² Univ. Bretagne Sud, UMR CNRS 6027, IRDL, F-56100 Lorient, France.

Résumé

Un exercice d'intercomparaison (*round-robin*) de mesures de propriétés thermophysiques a été initié par le groupe thématique « Hautes Températures et Hauts Flux » de la Société Française de Thermique. Une dizaine d'organismes de recherche (CEA, CEMTHI, CETHIL, ENSAM, ICA, Institut Jean Lamour, IMT Albi-Carmaux, IRDL, IRT Jules Verne, LMGC, LNE) ont décidé de participer à cet exercice (qui est toujours ouvert à d'autres participants).

Les grandeurs mesurables sont la masse volumique, la tension de surface, la viscosité, l'émissivité, la capacité calorifique, la diffusivité thermique et les conductivités thermiques et électriques. Une première réunion a permis de dresser un panorama des moyens de mesures de ces laboratoires français avec leurs forces et limitations.

Il a été décidé de proposer de séparer les mesures sur les métaux de celles sur des matériaux moins conducteurs. Dans un premier temps, avant d'aller vers des matériaux plus complexes, deux échantillons ont été approvisionnés : du fer et de l'alumine. Ils ont été coupés en sous-échantillons qui ont été transmis aux laboratoires participants. Les premiers résultats, tant sur l'état solide haute température que sur l'état liquide, sont attendus en 2024.

 Oral Poster Oral & Poster*Cocher la case souhaitée.*

Évaluation thermodynamique de tensions de surfaces liquide-gaz de mélange U-O-Zr avec l'équation de Butler

Arthur Tourneix¹, Caroline Denier¹, Romain Le-Tellier¹, Pascal Piluso¹, Jules Delacroix¹

¹CEA, DES, IRESNE, DTN, Cadarache
F-13108 Saint Paul-lez-Durance, France

Il convient de souligner le Prénom et le NOM de l'auteur qui assurera la présentation.

Résumé

L'estimation des propriétés physiques des matériaux impliqués dans la sûreté nucléaire est un aspect important pour la précision des simulations associées. Ce processus peut être particulièrement difficile dans les cas où les données expérimentales sont rares. La fragmentation des jets de corium en est un exemple [1]. En cas d'accident grave dans un réacteur nucléaire, le corium résultant de la fusion du cœur peut se relocaliser au fond de la cuve du réacteur ou dans l'enceinte du réacteur en cas de défaillance de la cuve. La présence éventuelle d'eau entraîne une interaction combustible-réfrigérant où un jet de corium à haute température se fragmente en gouttelettes tout en vaporisant une grande quantité d'eau en raison d'un transfert de chaleur important. Dans le pire des cas, le film de vapeur entourant ces gouttelettes est déstabilisé entraînant un contact direct entre l'eau et le corium résultant en d'autres fragmentations et une explosion-vapeur. Un tel événement risque de compromettre l'intégrité de la cuve ou de l'enceinte de confinement. Ces phénomènes de fragmentation dépendent fortement de la tension superficielle entre le corium liquide et la vapeur d'eau, comme le montrent les lois empiriques de fragmentation basées sur le nombre de Weber [1]. Cependant, il n'existe que peu ou pas de données sur cette propriété pour les mélanges de corium liquide en raison de la température très élevée et des composants impliqués [2].

Dans le but de fournir de telles données, des mesures expérimentales ont récemment été effectuées avec succès pour des mélanges U-O-Zr au CEA Cadarache dans l'installation VITI de la plateforme PLINIUS. Elles ont été réalisées en utilisant la méthode de la pression maximale de bulle d'Argon dans le corium liquide. En raison de la complexité de ces mesures, seul un ensemble limité de compositions et de températures a été étudié. Dans le but de construire des lois de tension de surface sur une plus large gamme de composition et de température, le travail présenté dans cet article utilise une approche de modélisation thermodynamique utilisant l'équation de Butler [3] et deux bases de données thermodynamiques différentes de type CALPHAD

(NUCLEA et TAF-ID) afin d'évaluer la tension de surface entre les mélanges liquides U-O-Zr et l'atmosphère d'Argon. Deux modèles différents sont considérés : d'une part, la formulation de Butler couramment appliquée pour les interfaces liquide-gaz qui incorpore les données de tension de surface des composants purs [3] et, d'autre part, une formulation plus simple de l'équation de Butler déjà utilisée dans la littérature pour les interfaces liquide-liquide [2]. La comparaison avec des mesures expérimentales et une analyse paramétrique limitée est présentée. Ces résultats soulignent l'intérêt d'une telle approche de modélisation pour l'évaluation de la tension superficielle du corium ainsi que la nécessité d'améliorer la modélisation de l'énergie de Gibbs en phase liquide dans les bases de données thermodynamiques.

Il convient de respecter les polices et les tailles de police ainsi que les marges adoptées sur ce modèle. La longueur du résumé n'est pas imposée mais cela doit rester un résumé.

Références

- [1] Brayer, Claude, Alexis Le Monnier, et Nourine Chikhi. « Impact of Corium Thermophysical Properties on Fuel-Coolant Interaction ». *Annals of Nuclear Energy* 147 (1 novembre 2020): 107613. <https://doi.org/10.1016/j.anucene.2020.107613>.
- [2] Gajavalli, Kasi, et Romain Le Tellier. « Butler-based Thermodynamic Modeling of Interfacial Energies for In-vessel Corium Systems ». *Journal of Nuclear Materials* 569 (1 octobre 2022): 153935. <https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2022.153935>.
- [3] Kaptay, George. « A Coherent Set of Model Equations for Various Surface and Interface Energies in Systems with Liquid and Solid Metals and Alloys ». *Advances in Colloid and Interface Science* 283 (1 septembre 2020): 102212. <https://doi.org/10.1016/j.cis.2020.102212>.

 Oral Poster Oral & Poster

Cocher la case souhaitée.

**Pressions d'oxygène mesurées par Transport ou Transpiration sur les oxydes:
cas de UO_2 à haute température**

¹Christian Chatillon (Conseils en Thermodynamique et Spectrométrie de masse, 21 allée du Mijou 38240 Meylan, christian.chatillon0979@orange.fr)

²Alexander Pisch, Science et Ingénierie des Matériaux et Procédés (1130 rue de la piscine 38400 Saint Martin d'Hères,)

Résumé

La méthode de transpiration a été très souvent utilisée pour mesurer les pressions d'équilibre d'oxygène notamment sur les métaux purs allant du métal pur à la formation de ses oxydes avec différents degrés d'oxydation. C'est le cas par exemple des applications pour le Fe et ses oxydes, mis en équilibre avec un flux d'argon dopé à l'oxygène. Selon la gamme des concentrations et des températures la pression d'oxygène à l'équilibre stationnaire avec l'échantillon doit être évalué en tenant compte de sa dissociation en $O(g)$. Dans le cas de la mesure sur les oxydes à haute température l'état stationnaire atteint entre l'échantillon d'oxyde et le flux de gaz incident ne peut pas être traité simplement en considérant la seule dissociation $O_2(g) = 2 O(g)$ connaissant la constante d'équilibre, mais doit aussi tenir compte de la vaporisation de l'oxyde qui contribue ainsi à l'équilibre stationnaire atteint dont la composition est connue en analysant l'échantillon après trempe.

L'exploitation des mesures de transpiration effectuées sur UO_{2+x} à haute température – atteignant 2700K – est pris comme exemple et nous montrons que ceci nécessite la mise en œuvre de calculs d'équilibre complexes par utilisation de logiciels de calculs thermodynamiques (FACT, THERMOCALC ou autre logiciel). La variable d'ajustement permettant de trouver l'état stationnaire expérimental est l'activité de l'oxygène dans l'échantillon. Les corrections de pressions d'oxygène et/ou d'activité de l'oxygène sont bien réelles et sont comparées avec les valeurs retenues lors de précédents travaux [1,2].

Références

[1] Thermodynamics of the O-U system. I - Oxygen chemical potential critical assessment in the UO_2 - U_3O_8 composition range, D. Labroche, O. Dugne, C. Chatillon, J. Nucl. Mat. 312, (2003), p.21-49

[2] Thermodynamics of the O-U system : IV – Critical assessment of chemical potentials in the U - $UO_{2.01}$ composition range, M. Baïchi, C. Chatillon, G. Ducros, K. Froment, J. Nucl. Mat. 349 (2006) 17-56

 Oral Poster Oral & Poster

Thermodynamique des interfaces en croissance hors équilibre

-

Modélisation de la solidification des alliages multicomposés

Gildas GUILLEMOT¹, Charles-André GANDIN¹, Christopher A. HARELAND², Peter W. VOORHEES²

¹Mines Paris, PSL University, CEMEF UMR CNRS 7635, CS10207, Sophia Antipolis 06904, France

²Department of Materials Science and Engineering, Northwestern University,
2220 Campus Drive, Evanston IL 60208, USA

Résumé

Une description thermodynamique du comportement des interfaces hors équilibre est proposée dans le contexte de l'étude de la croissance rapide de phases solides [1]. Le modèle développé, nommé PDM (Partial Drag Model), est appliqué dans le cadre des transformations de phases observées dans les alliages multicomposés. Les processus de traînage de soluté (*solute drag*) et de piégeage de soluté (*solute trapping*) sont suivis dans une même approche. Le modèle se base, ainsi, sur l'hypothèse d'une interface en croissance se développant à une composition effective, x^{eff} , pondérée entre les compositions des phases mère, x^m , et en croissance, x^p .

Le principe de dissipation d'énergie à l'interface amène à considérer deux contributions liées : 1) à l'avancée de l'interface à la composition imposée, x^{eff} , par effet d'adsorption, 2) au retour de la composition interfaciale, x^{eff} , à la composition de la phase en croissance, x^p , par rejet de soluté dans la phase mère. Ce principe, et les équations associées, conduisent à relier les compositions et écarts de potentiels chimiques aux vitesses d'interfaces et propriétés des milieux. Le modèle [2] est couplé avec la méthode CALPHAD et les appels à l'outil Thermo-Calc [3] pour la détermination des grandeurs thermodynamiques nécessaires.

Dans son application à la solidification des alliages métalliques, le modèle PDM prédit des changements significatifs dans les compositions interfaciales au regard des valeurs d'équilibre. En exploitant les propriétés du système Ag-Cu [4], comme illustré dans la figure, et dans le cadre des vitesses communément rencontrées lors des procédés de fabrication additive, ces écarts sont rendus visibles. Une présentation du modèle sera réalisée et des comparaisons avec les approches de la littérature présentées, notamment concernant le modèle CGM (Continuous Growth Model) de Aziz *et al.* [5-7] ou d'autres approches PDM [8]. Des méthodologies seront aussi proposées pour faciliter l'exploitation des propriétés des diagrammes obtenus.

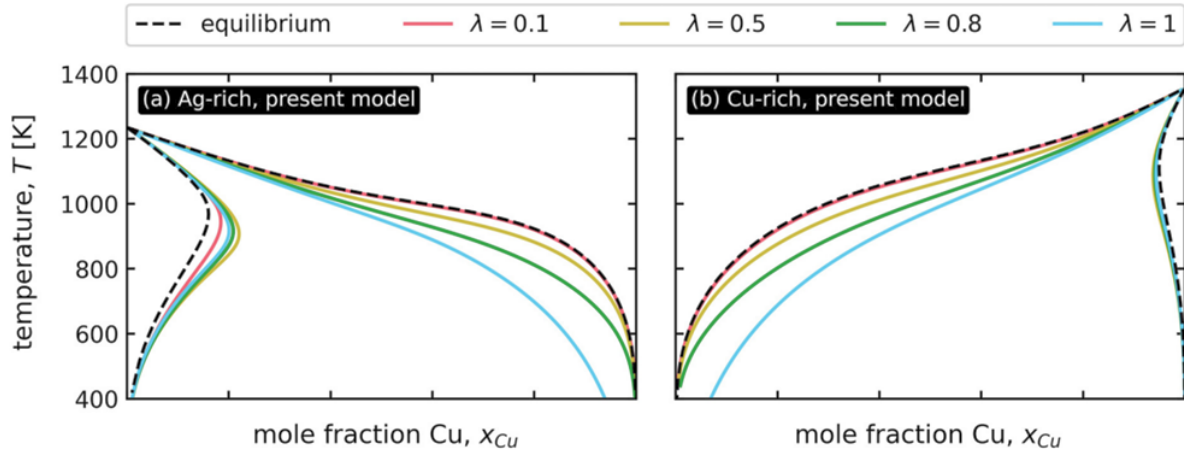


Fig. : Diagramme de phase cinétique pour le système Ag-Cu selon la valeur du paramètre de traînage de soluté λ (*solute-drag parameter*) pour $v = 0.1 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$, $v^D = 0.4 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$ et $v_0 = 850 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$ [1]. Les résultats du modèle PDM sont présentés sous la forme des lignes d'équilibre, fonction de λ . Les lignes de liquidus et solidus initiales (*i.e. équilibre thermodynamique sans effet cinétique*) sont indiquées en traits pointillés. Les données thermodynamiques exploitées sont apportées par Murray [4].

Références

- [1] C. A. Hareland, G. Guillemot, Ch.-A. Gandin, P. W. Voorhees, The thermodynamics of non-equilibrium interfaces during phase transformations in concentrated multicomponent alloys, *Acta Materialia* 241, 2022, 118407
- [2] Librairie Physalurgy, CEMEF, physalurgy.cemef.minesparis.psl.eu
- [3] Thermo-Calc, Thermo-Calc Software AB, Sweden, 2021, <https://thermocalc.com>
- [4] J.L. Murray, Calculations of stable and metastable equilibrium diagrams of the Ag-Cu and Cd-Zn systems, *Metallurgical Transactions A* 15 (2), 1984, 261–268
- [5] M.J. Aziz, Model for solute redistribution during rapid solidification, *Journal of Applied Physics* 53 (2), 1982, 1158–1168
- [6] M.J. Aziz, Dissipation-theory treatment of the transition from diffusion controlled to diffusionless solidification, *Applied Physics Letters* 43 (6), 1983, 552–554
- [7] M.J. Aziz, T. Kaplan, Continuous growth model for interface motion during alloy solidification, *Acta Metallurgica* 36 (8), 1988, 2335-2347
- [8] M.J. Aziz, W. Boettinger, On the transition from short-range diffusion-limited to collision-limited growth in alloy solidification, *Acta Metallurgica et Materialia* 42 (2), 1994, 527–537

 Oral Poster Oral & Poster

Molecular Dynamics modeling of thermodiffusion in solids presenting charged defects. The example of uranium dioxide

Guillaume BAREIGTS¹, Serge MAILLARD¹, Jean-Marc SIMON²

¹CEA, DES, IRESNE, DEC Cadarache F-13108 S-Paul-Lez-Durance, France

²Lab. Interdisciplinaire Carnot, CNRS-U. Franche Comté Bourgogne, Dijon, France

Résumé

Although of significant impact in high thermal gradients, thermodiffusion in solids has been quite little studied, due to experimental and theoretical difficulties. Among them, in the case of nuclear ceramics such as uranium dioxide, one can mention ¹⁾the control of the oxygen potential (μ_{O}) strongly affecting the heat of transport Q^* , as well as ²⁾the modelling of the electronic defects contribution, out of reach of atomistic techniques.

These features require specific modeling and simulation approaches. A thermodynamic defect model is used to represent Q^* as a function of the oxygen defect properties and μ_{O} , thus reducing the number of parameters to further calculate using Classical Molecular Dynamics. To simulate transport, oxygen ions O^{2-} have to be added to or removed from a stoichiometric simulation box. The corresponding negative charge increase is compensated through a uniform background charge, instead of randomly positioning U^{3+} or U^{5+} ions in the box. This “background approach” gives rise to a special model for the defect thermodynamics and allows the evaluation of the ionic partial molar properties in a simple manner. Five MD techniques are tested and compared to evaluate the oxygen contribution to the heat of transport: ^{a)} the direct simulation of the thermal gradient, ^{b)} the transient relaxation of a concentration gradient, ^{c)} the Constrained Molecular Dynamics, ^{d)} the Green-Kubo formalism, ^{e)} the imposed Electric Field. Only the two last ones proved to give similar and reliable results. These results are interpreted in terms of elementary defect heat of transport whose combination yields the complete contribution of oxygen to the heat of transport.

Références

- [1] Janek and Timm, Thermal Diffusion and Soret Effect in (U,Me)O₂+d : The Heat of Transport of Oxygen, Journal of Nuclear Materials 255, 116 (1998).
- [2] G. Bareigts, S. Maillard, and J.-M. Simon, Molecular Dynamics Modeling of Thermodiffusion in Solids with Charged Defects Using Uranium Dioxide as the Case Study, Chemical Engineering Science 281, 119141 (2023).

 Oral Poster Oral & Poster

Prediction de liquidus binaires et d'enthalpies de mélange par machine learning

Guillaume DEFFRENNES¹, Bengt HALLSTEDT², Taichi ABE³, Evelyne FISCHER¹, Stéphane GOSSÉ⁴, Kei TERAYAMA⁵, Ryo TAMURA³

¹ Univ. Grenoble Alpes, CNRS, Grenoble INP, SIMaP, F-38000 Grenoble, France

² Institute for Materials Applications in Mechanical Engineering (IWM), RWTH Aachen University, Augustinerbach 4, 52062, Aachen, Germany

³ National Institute for Materials Science, 1-1 Namiki, Tsukuba, Ibaraki 305-0044, Japan

⁴ Université Paris-Saclay, CEA, Service de Recherche en Corrosion et Comportement des Matériaux, 91191, Gif-sur-Yvette, France

⁵ Graduate School of Medical Life Science, Yokohama City University, 1-7-29, Suehiro-cho, Tsurumi-ku, Kanagawa 230-0045, Japan

Résumé

En comparant les diagrammes de phases à travers le tableau périodique, on peut distinguer des tendances qui sont particulièrement marquées le long de la série des terres rares. Nous travaillons au développement de modèles machine learning pour capturer ces tendances et prédire équilibres entre phases et propriétés thermodynamiques.

Nous présenterons des premiers travaux sur la prédiction de liquidus binaires entre 64 éléments des groupes 1 à 15 [1]. L'erreur moyenne sur la température de début de solidification est estimée à 102 K. Les données collectées et prédites dans 2016 binaires sont partagées en libre accès [2].

Nous parlerons ensuite de travaux en cours sur la prédiction d'enthalpies de mélange dans le liquide. Des estimations raisonnables de cette grandeur sont utiles dans le cadre de la modélisation CALPHAD, mais aussi en tant que descripteur (variable d'entrée) des modèles machine learning.

Références

- [1] G. Deffrennes, K. Terayama, T. Abe, E. Ogamino, R. Tamura, A framework to predict binary liquidus by combining machine learning and CALPHAD assessments, *Materials & Design* 232 (2023) 112111. Open access at <https://doi.org/10.1016/j.matdes.2023.112111>
- [2] G. Deffrennes, K. Terayama, T. Abe, E. Ogamino, R. Tamura, Datasets from "A framework to predict binary liquidus by combining machine learning and CALPHAD assessments", *Mendeley Data*, V2. Open access at <https://doi.org/10.17632/rj6gmnmmnt.2>

 Oral Poster Oral & Poster

Modélisation de l'évolution microstructurale d'alliages δ -PuAl en fonction de la température

Adrien FOURMONT¹, Clément Ciszak¹, Benoit Oudot¹

¹ CEA Centre de Valduc, 21120, Is-sur-Tille, France

Résumé

Le plutonium est l'un des éléments les plus complexes du tableau périodique. L'existence de six transitions de phases entre la température ambiante et son faible point de fusion fait qu'on lui préfère ses alliages en phase δ . L'Al est un élément qui stabilise cette phase (CFC). Cependant, la microstructure brute de solidification de ces alliages présente une ségrégation mineure en Al. Ce phénomène de « coring » est notamment induit par la traversée du fuseau $\epsilon+\delta$. Un traitement thermique d'homogénéisation est nécessaire afin d'obtenir une microstructure sans ségrégation. Cependant, lors de la solidification et du traitement thermique d'homogénéisation, un phénomène de croissance de grain se superpose à la diffusion chimique des espèces.

La combinaison de ces deux phénomènes –diffusion et croissance- rend la modélisation de l'évolution microstructurale du matériau compliquée. Les modèles existants ne permettent pas de prendre en compte cette superposition dans le cadre du Plutonium. Le but de cette étude est de modéliser l'évolution microstructurale depuis l'état brut de solidification jusqu'à l'état homogénéisé d'alliages PuAl. Une première étape pour réaliser cet objectif consiste à décrire l'état microstructural du matériau brut de solidification. En effet, une étude antérieure [1] rapporte que la vitesse de refroidissement impacte sensiblement la taille des grains, la taille et la forme des domaines de ségrégation, ainsi que l'amplitude de cette dernière. La deuxième étape consiste à déterminer de manière expérimentale la diffusivité des différents éléments au sein de la matrice δ et à la comparer aux données issues de la littérature [2]. La valeur du coefficient d'interdiffusion est primordiale puisque les cinétiques d'homogénéisation et de croissance granulaire dépendent toutes deux de ce dernier. Les résultats de ces deux parties seront intégrés dans des codes de simulations multi-physiques de type COMSOL®, qui permettent de gérer ces deux processus physiques simultanément.

Références

- [1] B. Spriet, Étude des transformations allotropiques du plutonium, Thèse de Doctorat de l'Université de Paris-Orsay, 1966.
- [2] R.E. Tate *et al.*, Diffusion in stabilized delta plutonium, 2. Aluminum, Journal of nuclear materials 29, 1969.

 Oral Poster Oral & Poster

Etude expérimentale à haute température, haute pression et modélisation CALPHAD du système Mg-Fe

Mathias Desseaux¹, Bruno Gardiola¹, Jérôme Andrieux¹, Christophe Le Bourlot², Sylvie Le Floch³, Paraskevas Parisiades⁴, Rainer Schmid-Fetzer⁵, Olivier Dezellus¹

¹ LMI, UMR CNRS 5615, Université Claude Bernard Lyon 1, F-69622 Villeurbanne, France.

² MATEIS, UMR CNRS 5510, INSA-Lyon, Univ Lyon, F-69621 Villeurbanne, France

³ ILM, UMR5306 Université Claude Bernard Lyon 1-CNRS, Université de Lyon, 69622 Villeurbanne Cedex, France

⁴ IMPMC, Sorbonne Université, Muséum National d'Histoire Naturelle, CNRS UMR 7590, 75005 Paris, France.

⁵ Institute of Metallurgy, Clausthal University of Technology, Robert-Koch-Str. 42, D-38678 Clausthal-Zellerfeld, German

Résumé

Les éléments fer et magnésium font l'objet de nombreuses études au sein de la communauté géochimique. Indirectement, la connaissance des équilibres entre phases au sein du système Fe-Mg est un élément clé pour obtenir une modélisation thermodynamique consistante pour des systèmes plus complexes, notamment des oxydes. À pression ambiante, le système Fe-Mg présente une immiscibilité totale à l'état solide et une lacune de démixtion importante à l'état liquide [1]. Cependant, on retrouve dans la littérature, notamment un article de N. Dubrovinskaia & al [2] des résultats montrant une augmentation significative de la solubilité du magnésium dans le fer à l'état solide, jusqu'à 7,8 at% à 89 GPa/3400 °C. Récemment, des calculs DFT ab-initio exposent la possibilité de formations de composés intermétalliques à haute pression [3], qui jusqu'alors n'ont jamais été confirmés expérimentalement.

L'objectif de ce travail de thèse est d'étudier les équilibres entre phases du système Fe-Mg dans des conditions extrêmes de température et de pression. Cela afin d'apporter de nouvelles données diagrammatiques, principalement sur la saturation du magnésium liquide en fer (présentation d'Olivier Dezellus), sur la formation potentielle des nouvelles phases haute pression ainsi que sur l'augmentation de la solubilité à l'état solide. Pour cela, une série d'expériences ont été réalisées à différentes conditions P-T (Four de trempe à pression atmosphérique, Presse Paris-Edinburgh, Presse Multi-enclume), des analyses ont été réalisées (MEB-EDS, ICP-AES, Tomographie X) pour caractériser et comprendre au maximum les microstructures et/ou compositions obtenues. Toutes ces données ont pour but de nourrir une modélisation CALPHAD du système, incluant la variable pression décrite selon le formalisme de Brosh & al [4]. Les premiers résultats de calculs montrent l'importance d'obtenir ces premières données, mais révèlent aussi la nécessité d'obtenir une base de données plus solide du point de vue physique pour éviter des extrapolations à partir de données peu nombreuses et menant à des prédictions inconsistantes.

Références

- [1] A.A. Nayeb-Hashemi et al., Bulletin of Alloy Phase Diagrams, (1985) 6, 235–238.
- [2] N. Dubrovinskaia et al., J. Phys.: Condens. Matter 16 (2004) S1143–S1150
- [3] P. Gao et al., New Journal of Chemistry, (2019) 43, 17403.
- [4] E. Brosh et al., Calphad, (2007) 31, 173-185.

 Oral Poster Oral & Poster

ALLIAGES A HAUTE ENTROPIE PAR APPROCHE THERMODYNAMIQUE ET DENSIFICATION RAPIDE DE POUDRES

Rkia TAMIM^{1,2}, Mathieu BOIDOT¹, Sylvie CHATAIN², Christine GUENEAU², Paul FOSSATI²

¹CEA, 17 Avenue des Martyrs Cedex 9, 38054 Grenoble, France

²Université Paris-Saclay, CEA, Service de recherche en Corrosion et Comportement des Matériaux, 91191 Gif-sur-Yvette, France

Résumé

Depuis 2004, un nouveau concept d'alliages est né, où au moins cinq éléments principaux de composition équiatomique ou quasi-équiatomique sont combinés pour former des solutions solides dépourvues d'intermétalliques [1,2]. Ils sont communément appelés alliages à haute entropie (AHE). Les proportions des éléments d'un alliage à haute entropie sont comprises entre 5 % at. et 35 % at [1].

Ces alliages font actuellement l'objet d'une attention particulière en science des matériaux et en ingénierie car ils présentent des propriétés exceptionnelles; surtout mécaniques, prometteuses à basse et à haute température [3]. Pour identifier les alliages de type AHE, de nouveaux enjeux font appel à la science des données (calculs thermodynamiques, Density Functionnal Theory, intelligence artificielle, data mining). L'acquisition d'un nombre important de données expérimentales sur ces alliages nécessite également un protocole spécial afin de les rendre accessibles.

La conception des alliages à haute entropie constitue un domaine d'intérêt scientifique et technique pour le CEA en répondant aux grands enjeux du développement des matériaux pour les grandes transitions et en particulier la transition énergétique. Notre travail s'inscrit dans le cadre du projet ETHERA qui est orienté vers la découverte de compositions d'AHE pour les milieux réacteurs à sels fondus. Ce projet a pour but de développer de nouveaux matériaux de type AHE en se basant sur six éléments Fe-Ni-Al-Cr-Co-Mo-Ti. Nous présentons la démarche retenue pour atteindre cet objectif.

Dans un premier temps, nous allons identifier les domaines de stabilité d'alliages monophasés ternaires, quaternaires et quinaires par combinaisons des six éléments cités ci-dessus en utilisant des outils de calculs thermodynamiques (Thermo-Calc, bases de données TCHEA et TCNi). Par la suite, le travail consistera à la réalisation d'échantillons par Spark Plasma Sintering (SPS) en utilisant le dispositif de dispense automatique de poudres pour le remplissage des matrices. La caractérisation se fera en parallèle des élaborations. Le développement de méthodes métallographiques semi-automatisées permettra l'acquisition de données sur un grand nombre d'échantillons (mesure de la taille de grains, porosité, dureté). Enfin, les modèles d'intelligence artificielle entraînés sur les données métallographiques d'ETHERA et sur les bases de données disponibles rendront possibles la prédiction de propriétés mécaniques longues et / ou courte à obtenir (fluage, limite élastique, module d'Young, tenue à la corrosion aux sels fondus, comportement sous irradiation).

Références

- [1] Dolique V, Thomann A.-L., Brault P. and al., Thermal stability of AlCoCrCuFeNi high entropy alloy thin films studied by in-situ XRD analysis, Surf. Coat. Tech., 204: 1989 – 1992 (2010).
- [2] Yurkova A.I., Cherniavsky V.V., Bolbut V. and al., Structure formation and mechanical properties of the high entropy AlCuNiFeCr alloy prepared by mechanical alloying and spark plasma sintering, J. Alloys Compd., 786:139 – 148 (2019).
- [3] Laurent-Brocq, M., & Couzinié, J. P. Alliages multi-composants à haute entropie-Concepts, microstructures et propriétés mécaniques, Tech. Ing. RE269-v1 (2017).


 Oral

 Poster

 Oral & Poster

Cocher la case souhaitée.

DÉVELOPPEMENT D'UN BANC DE LÉVITATION AÉRODYNAMIQUE POUR DES MESURES D'ENTHALPIE PAR CALOTIMÉTRIE À CHUTE INVERSE

Adrien CROCHETET¹, Séverine BRASSAMIN¹, Sawsen YOUSSEF¹, Jules DELACROIX², Pascal PILUSO², Emmanuel de BILBAO¹

¹ CEMHTI, 1D Avenue de la Recherche Scientifique, France

² CEA-Cadarache, DES/IRENE/DTN/SMTA/LEAG, France

Résumé

Le corium est une substance multicomposants et multiphasiques résultant de la fusion totale ou partielle du combustible, de sa gaine ainsi que d'autres composants métalliques présents dans le cœur d'un réacteur nucléaire. Ce mélange peut ensuite percer le fond de la cuve du réacteur lors de son déplacement, voire percer l'enceinte en béton autour de la cuve, conduisant au pire scénario d'accident possible et à une augmentation de la complexité de la composition du corium. Pour prévenir de tels accidents, ou en limiter l'impact, il est essentiel d'étudier les propriétés du corium. Cependant, la dangerosité du corium et surtout la complexité et la multiplicité de ses compositions compliquent son étude. Pour surmonter cette difficulté, une approche numérique, basée sur la simulation, apparaît comme une solution particulièrement intéressante. Cependant, cette approche soulève un nouveau problème : le manque de données sur les propriétés thermodynamiques des matériaux en corium, et des matériaux en général, à très haute température (> 2000 °C).

L'objectif de ce travail, qui s'inscrit dans le cadre du projet NEEDS - PROTECT, est de fournir des données thermodynamiques, notamment pour le liquide, pour les éléments constitutifs du corium. Pour ce faire, un dispositif de calorimétrie à chute inverse à très haute température et basé sur la lévitation aérodynamique est en cours de développement au CEMHTI. Le développement d'un tel dispositif met en évidence les difficultés des mesures à haute température dans tous les domaines.

 Oral Poster Oral & Poster

Modélisation du processus de microségrégation en solidification rapide

–

Application à l'alliage d'intérêt aéronautique IN718

Paul MARTIN^{1,2}, Gildas GUILLEMOT¹, Charles-André GANDIN¹, Michel BELLET¹,
François PICHOT², Nicolas LERICHE², Yaasin MAYI²

¹ Mines Paris, PSL University, CEMEF UMR CNRS 7635, CS10207, Sophia Antipolis 06904, France

² Safran Additive Manufacturing Campus, rue de Touban – BP 90053, 33185 Le Haillan, France

Résumé

La fusion laser sur lit de poudre (L-PBF) est considérée comme un procédé particulièrement prometteur dans l'industrie aéronautique pour développer de nouveaux composants et pièces de moteur. Cependant, la fiabilité et la durabilité des éléments produits par ce procédé dépendent de la possibilité d'empêcher, lors de l'élaboration des pièces, l'apparition de tout défaut, en particulier, ceux liés à la fissuration à chaud. Ces derniers sont dus au film liquide persistant entre les grains, à la fin de l'étape de solidification, dans un milieu encore pâteux et subissant des contraintes et déformations élevées.

Afin d'estimer le risque d'apparition de ce mécanisme de fissuration à chaud en procédé L-PBF, un modèle de microségrégation adapté, fournissant une prédiction du chemin de solidification, est nécessaire, couplé avec une analyse thermomécanique de l'évolution des alliages. En réponse à ce besoin industriel, un nouveau modèle est ainsi proposé [1] et appliqué dans les conditions de refroidissement rencontrées en L-PBF. Cette approche intègre les conditions initiales de solidification et suit l'évolution des phases, et de leur composition, dans la région du fluide interdendritique, amenant à une estimation de la plage de fragilisation. Le modèle de croissance dendritique [2] et le diagramme de phases exploité intègrent l'effet cinétique, lié à une croissance interfaciale hors équilibre [3]. La diffusion croisée des espèces solutés dans la phase liquide est considérée ainsi que le couplage thermodynamique [4] avec l'approche CALPHAD à travers l'outil Thermo-Calc [5]. Le modèle est appliqué au super-alliage base nickel inconel IN718 [6,7], largement utilisé dans l'industrie aéronautique et les résultats obtenus sont discutés.

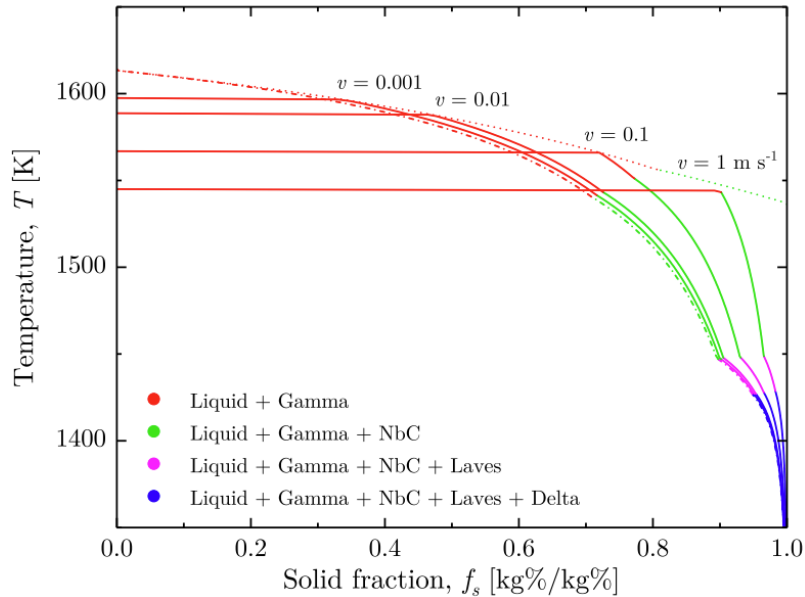


Fig. : Chemin de solidification suivi par l'alliage In718 en solidification rapide. Les courbes pleines correspondent au modèle de microségrégation proposé, appliqué pour plusieurs vitesses de croissance dendritique $v \in \{0.001, 1\} \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$, d'intensité croissante. Ces simulations aboutissent aux différentes surfusions visibles, indiquant le début de solidification. Les résultats présentés, couplés à l'outil Thermo-Calc [4-7], ont été obtenus avec une valeur du paramètre de traînage de soluté λ (*solute-drag parameter*) de $0,5 \text{ mol} \cdot \text{mol}^{-1}$.

Références

- [1] P. Martin, G. Guillemot, M. Bellet, F. Pichot, N. Leriche, Y. Mayi, Ch.-A. Gandin, Solidification path for rapid solidification - Application to multicomponent alloys for L-PBF, Modelling of Casting, Welding and Advanced Solidification Processes (MCWASP XVI) Conference, Banff, Alberta, Canada, 18-23 Jun 2023
- [2] G. Guillemot, O. Senninger, C. A. Hareland, P. W. Voorhees, Ch.-A. Gandin, Thermodynamic coupling in the computation of dendrite growth kinetics for multicomponent alloys, Calphad 77, 2022, 102429
- [3] C. A. Hareland, G. Guillemot, Ch.-A. Gandin, P. W. Voorhees, The thermodynamics of non-equilibrium interfaces during phase transformations in concentrated multicomponent alloys, Acta Materialia, Volume 241, 2022, 118407
- [4] Librairie PhysalurgY, CEMEF, physalurgy.cemef.minesparis.psl.eu
- [5] Thermo-Calc, Thermo-Calc Software AB, Sweden, 2021, <https://thermocalc.com>
- [6] Base de données TCNI10 \ Ni-Alloys version v10.0, Thermo-Calc Software AB, Sweden
- [7] Base de données MOBNI5 \ Ni-Alloys Mobility version v5.1, Thermo-Calc Software AB, Sweden


 Oral

 Poster

 Oral & Poster

Non-equilibrium synthesis of new transparent ceramics in the $Gd_2O_3 - Nb_2O_5$ ternary diagram

Renaud Valois^{1,2}, Mathieu Allix¹, Michael J. Pitcher¹, Emmanuel Véron¹, Véronique Jubera²

¹CEMHTI UPR3079 CNRS, 1D Av. de la Recherche Scientifique, 45100, Orléans

²ICMCB UMR5026 CNRS, 87 Av. du Dr. Schweitzer, 33600, Pessac

Résumé

Optoelectronic devices operating in the mid-infrared region are useful for many applications such as telecommunications, defence and healthcare. To improve the efficiency of such devices, it is important that compact, high-energy laser sources in the 1.7 - 2.7 μm window, are developed [1]. In order to produce mid-infrared laser emission, a gain material, whose emission extends beyond the NIR, can be used. In this work, the Ho^{3+} ion was chosen as the optically active element due to its $^5I_7 - ^5I_8$ transition between 1.95 and 2.15 μm [2],[3].

During this project, the $Gd_2O_3-Nb_2O_5$ pseudo-binary diagram has been explored in order to synthesise new transparent ceramics which can be used as laser gain media. The syntheses were carried out by out-of-equilibrium phase crystallisation from the glass or deeply undercooled melt using aerodynamic levitation coupled with laser heating (CO_2). This technique has several advantages over the conventional synthesis method of obtaining ceramics by powder sintering. Firstly, the sample can be heated to a very high temperature (up to 3000°C), the cooling rate is of the order of several hundred degrees per second, and finally the sample is levitated, which prevents any heterogeneous crystallisation by contact during cooling. Focusing on the synthesis of Gd_3NbO_7 pyrochlore, a solid solution was discovered by increasing the gadolinium amount according to the formula $Gd_{3+x}Nb_{1-x}O_{7-x}$ between $x=0.2$ and $x=0.5$. The transparency was achieved for these compositions. Moreover, a cationic ordering was observed thanks to the evolution of superstructure peaks in the diffraction patterns. The structural properties of the samples were studied by X-Ray diffraction, Variable-Temperature X-Ray-diffraction and electron microscopy.

Références

- [1] Guene-Girard, S. *et al. Mater. Res. Bull.* **143**, 111451 (2021).
- [2] Payne, S. A. *et al.. IEEE J. Quantum Electron.* **28**, 2619–2630 (1992).
- [3] Reddy, B. R., Nash-Stevenson, S. & Venkateswarlu, P. *JOSA B* **11**, 923–927 (1994).

 Oral Poster Oral & Poster

**A computationally-guided glass-crystallisation approach to materials discovery
in the SrO-Al₂O₃-SiO₂ phase field**

Euan Duncan¹, Amandine Ridouard¹, Franck Fayon¹, Chris M. Collins² and Michael J. Pitcher¹

¹Affiliation auteur 1 (CNRS, CEMHTI UPR 3079, F-45071 Orléans, 45071, France)

²Affiliation auteur 2 (University of Liverpool, Liverpool, UK Institution, L69 7ZX)

Résumé

Metastable phases often have distinct and interesting properties, and the use of computationally guided approaches and non-equilibrium synthesis routes is becoming increasingly more common in the search for these phases due to their advantages in efficiency and energy kinetics. However, a study in which both of these techniques are combined has yet been done, leaving potentially a whole host of metastable compositions undiscovered even in well explored diagrams. In this work we examine the SrO-Al₂O₃-SiO₂ ternary diagram to test the effectiveness of glass crystallisation (GC) synthesis when paired with a probe structure (PS) compositional method for the guided discovery of new metastable materials with glass-forming chemistries. After a full PS analysis was conducted on the SrO-Al₂O₃-SiO₂ phase, low energy regions were identified which could hold new phases. An area close to the SrO-SiO₂ binary line yielded the new compound, Sr₂Si₃O₈, which forms a one-dimensional crystal framework with infinite [Si₃O₈] ribbons, the first of its kind. Sr₂Si₃O₈ is metastable, decomposing into SrSiO₃ + SiO₂ above 1050°C, proving the usefulness of this combined approach as typical solid-state conditions would miss this phase entirely. This methodology presents an interesting opportunity to explore or even re-explore phase diagrams, as PS analysis can be conducted on a wide range of oxide systems and a number of non-equilibrium synthesis routes exist.

 Oral Poster Oral & Poster**TITRE : Modélisation du diagramme de phases pseudo-binaire $\text{Li}_2\text{O}-\text{MoO}_3$** **Kaoutar NACIRI¹, Guillaume DEFFRENNES¹, Christian CHANTILLON¹, Alexander PISCH¹,
Ioana NUTA¹, Matias VELAZQUEZ¹,**¹ Univ. Grenoble Alpes, CNRS, Grenoble INP, SIMAP, F-38000 Grenoble, France

Résumé

La haute pureté des cristaux est la qualité essentielle pour les utiliser dans les bolomètres cryogéniques à chaleur-scintillation (BCCS). Précisément, il est important d'éliminer toute radio-impureté (K, Th, U...) qui peut impacter les résultats des signaux (e.g. le bruit de fond dans la recherche de double décroissance bêta sans neutrino ($0\nu 2\beta$)).

Les cristaux de Li_2MoO_4 (LMO) sont prometteurs pour ces applications. Leurs propriétés mécaniques, structurales et physicochimiques ont été étudiées expérimentalement par plusieurs auteurs. Cependant, une étude récente [1] soulève des interrogations sur les diagrammes de phases des systèmes Li-Mo-O-X (X=K, Th, U), en particulier en ce qui concerne le coefficient de partage (k_0) des impuretés dans LMO qu'il est important de connaître pour la purification des cristaux.

Les études antérieures de la section $\text{Li}_2\text{O}-\text{MoO}_3$ mentionnent la présence de molybdates ternaires Li_4MoO_5 , Li_2MoO_4 , $\text{Li}_2\text{Mo}_2\text{O}_7$, $\text{Li}_4\text{Mo}_5\text{O}_{17}$, $\text{Li}_2\text{Mo}_3\text{O}_{10}$ et $\text{Li}_2\text{Mo}_4\text{O}_{13}$. Cependant, la congruence ou l'incongruence de certaines composées et la stabilité de $\text{Li}_2\text{Mo}_2\text{O}_7$ et $\text{Li}_2\text{Mo}_3\text{O}_{10}$ dans la section sont débattues [2].

Dans notre travail, une modélisation thermodynamique de la section $\text{Li}_2\text{O}-\text{MoO}_3$ a été réalisée dans l'optique de décrire des systèmes Li-Mo-O-X (X=K, Th, U). L'énergie de Gibbs des composés Li_2MoO_4 , $\text{Li}_4\text{Mo}_5\text{O}_{17}$ et $\text{Li}_2\text{Mo}_4\text{O}_{13}$ ainsi que du liquide sont optimisées sur la base de notre revue des données thermodynamiques et relatives aux équilibres entre phases disponibles dans la section. Des premiers résultats et des perspectives seront présentés.

Références

- [1] Velázquez, M., et al., Exploratory growth in the $\text{Li}_2\text{MoO}_4-\text{MoO}_3$ system for the next crystal generation of heat-scintillation cryogenic bolometers. *Solid State Sciences*, 2017. 65: p. 41-51
- [2] Moser, M., et al., Re-determination of the pseudobinary system $\text{Li}_2\text{O} - \text{MoO}_3$. *Crystal Research and Technology*, 2008. 43(4): p. 350-354.

 Oral Poster Oral & Poster

Etude thermodynamique de l'influence de l'addition d'alumine Al_2O_3 dans le système $CaO-SiO_2-YO_{1,5}$

Justine BONNAL¹, Sofiane MERMOUL¹, Carine PETITJEAN¹, Pierre-Jean PANTEIX¹, David BONINA¹, Christine GENDARME¹, Simon ARNAL², Michel VILASI¹

¹ Université de Lorraine, CNRS, IJL, F-54000 Nancy, France

² Safran Ceramics, 33700 Mérignac, France

La réduction de l'impact environnemental des moteurs aéronautiques passe par l'augmentation de leur température de fonctionnement. Dans cet objectif, les matériaux composites à matrice céramique (CMC) sont envisagés comme substitut aux superalliages de nickel pour des pièces telles que les aubes de turbine. Des barrières environnementales (EBC) sont cependant nécessaires pour protéger les CMC contre la dégradation par les produits de combustion. Pour cette application, les silicates de terres rares sont considérés comme étant de bons candidats. Le développement des EBC est aujourd'hui limité par la corrosion due aux interactions avec des particules ingérées par le moteur en vol (sables, poussières, cendres) et constituées d'aluminosilicates de calcium et magnésium (CMAS). Aux températures de fonctionnement, ces particules passent à l'état liquide et s'infiltrent dans le revêtement, provoquant des dégradations thermomécaniques et thermochimiques. Ces dernières sont dues à la dissolution du silicate de terres rares dans le liquide silicaté et à la précipitation de nouvelles phases. Il est donc nécessaire d'étudier la réactivité entre l'EBC et le CMAS afin de prédire la durée de vie du système. Des données thermodynamiques et cinétiques sont disponibles dans la littérature [1,2] mais doivent être complétées, notamment aux températures d'intérêt.

Du fait du très large domaine de composition des CMAS, un système modèle simplifié peut être utilisé pour avoir une meilleure compréhension des phénomènes thermochimiques mis en jeu. L'interaction entre les céramiques et les CMAS peut amener à la précipitation de phases telles que l'apatite $Ca_2RE_8(SiO_4)_6O_2$ et le cyclosilicate $Ca_3RE_2(Si_3O_9)_2$ dont le caractère potentiellement couvrant pourrait fournir une protection pour l'EBC. La stabilité de ces phases dépend d'un grand nombre de paramètres. Dans l'étude proposée ici, l'influence de l'addition d'alumine Al_2O_3 dans le système ternaire $CaO-SiO_2-YO_{1,5}$ est abordée afin d'identifier l'étendue du domaine liquide à 1300°C et de déterminer la stabilité thermodynamique des phases présentes à l'équilibre.

Références

- [1] D. L. Poerschke, T. L. Barth, O. Fabrichnaya, C. G. Levi, Journal of the European Ceramic Society, 36 (2016) 1743-1754
- [2] F. Perrudin, C. Rio, M. H. Vidal-Setif, C. Petitjean, P. J. Panteix, M. Vilasi, Journal of the European Ceramic Society, 37 (2017) 2657-2665

 Oral Poster Oral & Poster*Cocher la case souhaitée.*

Exercice de comparaison de mesures de propriétés thermophysiques à hautes températures

Christophe JOURNEAU¹, Jules DELACROIX¹, Mickaël COURTOIS², Philippe LEMASSON²

¹ CEA, CEA, DES, IRESNE, DTN, Cadarache, F-13108 Saint-Paul-lez-Durance, France

² Univ. Bretagne Sud, UMR CNRS 6027, IRDL, F-56100 Lorient, France.

Résumé

Un exercice d'intercomparaison (*round-robin*) de mesures de propriétés thermophysiques a été initié par le groupe thématique « Hautes Températures et Hauts Flux » de la Société Française de Thermique. Une dizaine d'organismes de recherche (CEA, CEMTHI, CETHIL, ENSAM, ICA, Institut Jean Lamour, IMT Albi-Carmaux, IRDL, IRT Jules Verne, LMGC, LNE) ont décidé de participer à cet exercice (qui est toujours ouvert à d'autres participants).

Les grandeurs mesurables sont la masse volumique, la tension de surface, la viscosité, l'émissivité, la capacité calorifique, la diffusivité thermique et les conductivités thermiques et électriques. Une première réunion a permis de dresser un panorama des moyens de mesures de ces laboratoires français avec leurs forces et limitations.

Il a été décidé de proposer de séparer les mesures sur les métaux de celles sur des matériaux moins conducteurs. Dans un premier temps, avant d'aller vers des matériaux plus complexes, deux échantillons ont été approvisionnés : du fer et de l'alumine. Ils ont été coupés en sous-échantillons qui ont été transmis aux laboratoires participants. Les premiers résultats, tant sur l'état solide haute température que sur l'état liquide, sont attendus en 2024.