

Proposition de Stage de M2

Etude théorique des mécanismes élémentaires du frittage des conducteurs ioniques en présence de champ électrique.

La technique du frittage flash (Spark Plasma Sintering) (SPS) a révolutionné la synthèse de nouveaux matériaux en autorisant une compaction extrêmement rapide (en comparaison des autres techniques) de poudres d'une large gamme de matériaux (isolants, semi-conducteurs, conducteurs ioniques ou métalliques). L'intérêt pour cette technique a poussé l'installation d'une plateforme SPS à Toulouse à travers un projet porté par le CEMES et de nombreux chercheurs (expérimentateurs et théoriciens) du groupe Matériaux Cristallins sous Contrainte (MC2) s'y sont impliqués. Dans la technique SPS, le frittage est obtenu par l'application d'impulsions électriques très courtes (30 ms) d'une très haute intensité sur une poudre comprimée. Les densités de courant mises en jeu sont si importantes qu'elles peuvent modifier les processus élémentaires du frittage.

Malgré les efforts considérables effectués dans le développement et la synthèse des nouveaux matériaux par cette technique, les processus élémentaires du frittage flash restent méconnus. Au sein du groupe MC2, un projet d'étude de ces mécanismes aussi bien au niveau théorique qu'expérimental démarre à travers une demande de moyens à l'Agence National pour la Recherche. Au niveau théorique, il est envisagé d'étudier l'effet d'un champ électrique continue ou d'un courant électrique continue sur les modifications des propriétés de diffusion atomique (électromigration), sur les profils de température dans l'échantillon, et sur les mécanismes du frittage dans des isolants, semi-conducteurs, conducteurs ioniques et conducteurs métalliques.

Dans le cadre de ce stage, nous restreindrons l'étude à un conducteur ionique modèle, le Chlorure de Sodium en présence d'un champ électrique. Des simulations en dynamique moléculaire, utilisant le logiciel LAMMPS et/ou un code développé au laboratoire permettront d'effectuer une étude à l'échelle du micromètre. Cette échelle autorise la prise en compte de la polycristallinité de chaque grain de poudre (joint de grain) ainsi que les interfaces entre différents grains. Les interactions atomiques seront modélisées en utilisant des potentiels semi-empiriques (purement ionique ou de type "shell-model"). Cette partie du projet concernant les conducteurs ioniques a pour but d'étudier l'effet du champ électrique sur les propriétés de diffusion atomique au niveau des interfaces entre grains de poudre et au niveau des joints de grains en prenant compte les influences de l'orientation relative des grains, de l'intensité du champ électrique et de la taille des grains. Dans le cadre de ce stage, nous focaliserons nos efforts sur l'étude de la diffusion atomique dans les joints de grains de hautes symétries.

Contacts :

Combe Nicolas
Groupe MC2
CEMES
29, rue Jeanne Marvig, BP 94347,
31055 Toulouse Cedex 4 , France
Tel : 33 (0) 562.25.79.98
email : Nicolas.Combe@cemes.fr

Joseph Morillo
Groupe MC2
CEMES
29, rue Jeanne Marvig, BP 94347,
31055 Toulouse Cedex 4 , France
Tel : 33 (0) 562.25.79.85
email : Joseph.Morillo@cemes.fr