

Proposition de Stage de Master 2

Intitulé : Modélisation de la structure et des propriétés physiques de verres de chalcogénures

Descriptif du sujet :

Les verres à base de chalcogénures sont connus pour posséder un large spectre de propriétés photo-induites (transition réversible amorphe-cristal sous irradiation laser, photofluidité, photodilatation ...).^[1] Certaines de ces propriétés autorisent le stockage optique d'information (DVD) ou la réalisation de mémoires non-volatiles, comme c'est le cas dans le système Ge-Sb-Te (Figure 1).

D'autres compositions à base de tellure sont dotées de larges fenêtres de transparence infrarouge. Cette caractéristique associée aux possibilités de mises en forme de ces matériaux amorphes (fabrication de lentilles et de fibres optiques - Figure 1) permet d'envisager de nombreuses applications (imagerie thermique, spectroscopie déportée par ondes évanescentes, transport de lumière laser CO₂, ...).^[2]

Plus récemment, l'incorporation de cuivre ou d'argent dans les systèmes binaires Ge-Te ou As-Te a permis d'augmenter sensiblement la conductivité électrique de ces verres et d'ouvrir ainsi le champ, actuellement en plein essor, de la thermoélectricité à ces matériaux.^[3]

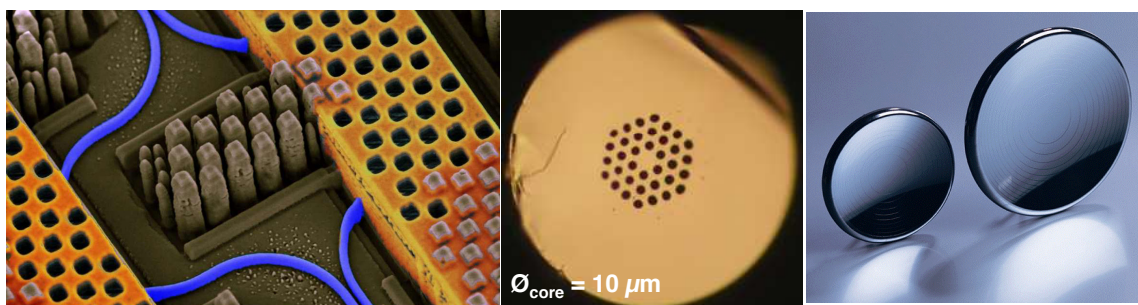


Figure 1: (à gauche) Puce mémoire basée sur le système Ge-Sb-Te développée par IBM, (au centre) fibre microstructurée et (à droite) lentille transparente dans l'infrarouge en verres de chalcogénures

En dépit de leurs qualités intrinsèques, les informations structurales sur les verres de chalcogénures demeurent limitées, ce qui limite par conséquent les possibilités de rationalisation et d'optimisation de leurs propriétés. Le projet de stage a pour objectif de contribuer à combler cette lacune en étudiant les processus de formation et d'organisation de verres dits spéciaux au moyen de simulations par dynamique moléculaire.

[1] A. Zakery and S. R. Elliott, "Optical properties and applications of chalcogenide glasses: a review" *J. Non-Cryst. Solids*, 2003, **330**, 1–12.

[2] X. Zhang, B. Bureau, P. Lucas, C. Boussard-Plédel and J. Lucas, "Glasses for seeing beyond visible" *Chem. Eur. J.* **2008**, *14*, 432–442

[3] A. Pereira Gonçalves, E. Branco Lopes, O. Rouleau and C. Godart, "Conducting glasses as new potential thermoelectric materials: the Cu-Ge-Te case" *J. Mater. Chem.* **2010**, *20*, 1516–1521.

Responsable : Eric Furet

e-mail : eric.furet@ensc-rennes.fr - Tél : 02-23-23-81-06

Equipe Chimie Théorique Inorganique , UMR 6226