

## Proposition de Stage de Master 2

Intitulé : *Structure et propriétés physiques de verres spéciaux par dynamique moléculaire*

Descriptif du sujet :

Les verres sont des matériaux connus de longue date et que l'on retrouve dans un large panel de domaines, depuis le secteur de la construction immobilière ou automobile, en passant par les télécommunications avec les fibres optiques ou encore, en tant que matrice pour le stockage de déchets ultimes. Il s'agit alors le plus souvent de verres d'oxydes, dérivés plus ou moins complexes de verres de silice.

Plus récemment, de nouvelles familles de verres dits spéciaux ont été développées au sein de l'équipe *Verres et Céramiques* de l'*Institut des Sciences Chimiques de Rennes*. Celles-ci reposent sur la combinaison de soufre/sélénium/tellure et d'éléments adjacents du tableau périodique pour donner des matériaux dotés de propriétés photo-induites originales (transition réversible amorphe-cristal sous irradiation laser, photofluidité, photodilatation ...).<sup>[1]</sup> 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 en photonique (imagerie thermique, spectroscopie déportée par ondes évanescentes, transport de lumière laser CO<sub>2</sub>, ...).<sup>[2]</sup>

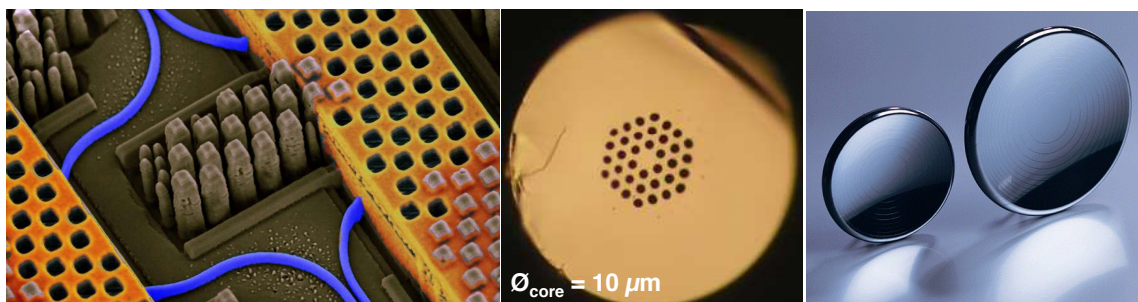


Figure 1: (à gauche) Puce mémoire basée sur le système Ge-Sb-Te développée par IBM, (au centre) fibre microstructurée et (à droite) lentille transparente dans l'infrarouge en verres de chalcogénures

Malheureusement, en dépit de leurs multiples qualités, la structure des matériaux vitreux constitue toujours un challenge de nos jours car, les méthodes de diffraction X et neutrons ne sont pas aussi informatives que pour les matériaux cristallins. Par conséquent, il est difficile de d'interpréter précisément l'origine des propriétés observées, voire de les optimiser de façon rationnelle. L'objectif du stage est donc d'étudier, au moyen de simulations par dynamique moléculaire, les **processus de structuration de verres de chalcogénures**. Nous chercherons à nous intéresser plus particulièrement à la famille des **verres Ga-Sb-Se**, identifiée comme apte à la **céramisation**.

[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

Responsable : Eric Furet ; e-mail : [eric.furet@ensc-rennes.fr](mailto:eric.furet@ensc-rennes.fr) - Tél : 02-23-23-81-06 ; Equipe *Chimie Théorique Inorganique* , UMR 6226