

Compte-rendu de la 1^{ère} réunion sur la Thermodynamique des Matériaux Haute Température organisée par le GdR ThermaHT

L'année 2013 a été une année particulière pour notre communauté avec la création du GdR Thermodynamique des Matériaux Haute Température (ThermaHT). C'est dans ce cadre plus officiel qui nous a été donné par le CNRS que nous avons eu le plaisir d'organiser la première réunion du GdR faisant suite au Séminaire Annuel de Thermodynamique Expérimentale Haute Température.

La réunion a eu lieu sur un jour et demi les 16 et 17 Janvier sur le campus de l'Institut de Chimie et des Matériaux Paris-Est (ICMPE) à Thiais.

Le GdR a pu prendre en charge les coûts de l'organisation (repas et pauses café) ainsi que les missions des doctorants qui en avaient fait la demande.

La participation a été très importante (54 personnes inscrites plus des membres de l'ICMPE assistant aux conférences) ce qui est un très bon signe pour notre communauté.

Nous avons souhaité réserver un espace aux doctorants avec une session dédiée et nous les félicitons pour la qualité de leurs présentations. Une autre session a été consacrée aux comptes-rendus des différents groupes de travail créés par le GdR.

En tout, 26 présentations orales ont été effectuées dont la liste est donnée ci-après ainsi que les résumés et la liste des participants. Elles ont bien représentées la variété des matériaux (des métaux aux céramiques, des hydrures aux carbures), des problématiques (industrielles et fondamentales), des thématiques (diagrammes de phases, calorimétrie, thermodynamique) et des approches (calcul DFT, Calphad, déterminations expérimentales). A noter, comme toujours, une participation importante de plusieurs centres du CEA avec la poursuite d'activités très fortement liées à la thermodynamique et aux diagrammes de phases. Des discussions très enrichissantes ont pu se dérouler à la fin de chaque exposé et pendant les pauses.

Il a été demandé à chaque auteur présentant s'il était possible de diffuser les présentations sur le site du GdR.

Pour terminer, une petite photo de groupe que nous devons à Suzana :



En vous remerciant une nouvelle fois d'avoir contribué à faire un succès de ces journées.

Les organisateurs, Jean-Claude Crivello (crivello@icmpe.cnrs.fr) et Jean-Marc Joubert (joubert@icmpe.cnrs.fr)

16 et 17 Janvier 2014 - ICMPE (Thiais)

1^{ère} réunion sur la Thermodynamique des Matériaux Haute Température organisée par le GdR ThermaHT

Programme

Jeudi 16 Janvier 2014

09:30 - 10:00 *Accueil : café, viennoiseries*

modérateur : J.-M. Joubert

10:00 - 10:10	Jean-Marc	Joubert	<i>ICMPE</i>	Message de bienvenue
10:10 - 10:40	Mauro	Palumbo	<i>ICAMS</i>	Achievements and challenges in first-principles calculations of temperature-dependent thermophysical properties
10:40 - 11:00	Ioana	Nuta	<i>SIMAP</i>	Comportement des matériaux lors des cycles de brasage des ampoules à vide pour disjoncteur à moyenne tension
11:00 - 11:20	Pascal	Richet	<i>IPGP</i>	Propriétés vibrationnelles et configurationnelles des liquides à haute température

11:20 - 11:30 *courte pause*

modérateur : O. Dezellus

11:30 - 11:50	Christophe	Drouet	<i>CIRIMAT</i>	Experimental and Predicted Thermodynamic Properties of Phosphate Apatite Minerals in view of Applicative Purposes
11:50 - 12:10	Alexandre	Berche	<i>Univ-Montpellier</i>	Couplage ab-initio / méthode Calphad : application au système Cr-Ge-Mn-Si
12:10 - 12:30	Suzana	Gomes Fries	<i>ICAMS</i>	The achievements of the Ringberg Unary Workshop

12:30 - 14:00 *repas du midi*

modérateur : C. Guéneau

14:00 - 14:15	Lionel	Montagne	<i>Univ-Lille</i>	Présentation du GDR Verre
14:15 - 14:30				* Thermodynamique des verres (Rogez)
14:30 - 14:45	Présentation des groupes de travail du GDR ThermaHT			* Analyses thermodynamiques à haute température (Lomello)
14:45 - 15:00				* Propriétés thermodynamiques des oxy-carbures (Dezellus)
15:00 - 15:15				* "SiC" (Chatillon)
15:15 - 15:20				* Nouvelles propositions
15:20 - 15:40	Pascal	Piluso	<i>CEA</i>	Thermodynamique appliquée accidents graves de réacteurs nucléaires
15:40 - 15:50	Jacqueline	Etay	<i>CNRS</i>	Présentation d'un dispositif expérimental de calorimétrie

15:50 - 16:20 *pause*

Jeudi 16 Janvier (suite) - Session des doctorants

modérateur : C. Toffolon-Masquet

16:20 - 16:30	Nicolas	Brisset	<i>univ-Rennes</i>	Etude du diagramme binaire U-Si
16:30 - 16:50	Michal	Strach	<i>IM2NP</i>	In-situ high temperature X-ray diffraction study of the oxidation products and kinetics of uranium-plutonium mixed oxides up to 1773 K.
16:50 - 17:10	Natacha	Bourgeois	<i>ICMPE</i>	Modélisation de systèmes métal-hydrogène
17:10 - 17:30	Sébastien	Bordier	<i>CEA</i>	Modélisation thermodynamique des phases molybdates se formant lors de la vitrification des déchets nucléaires de haute activité.
17:30 - 17:50	Tam Ngoc	Pham Thi	<i>CEA</i>	Study of the binary system Cs-Te
17:50 - 18:00	Maya	Cherif	<i>SIMAP</i>	Etude des céramiques eutectiques à base d'oxydes réfractaires

20:00 - *dîner à Paris 13***Vendredi 17 Janvier 2014**

modérateur : M. Lomello

09:00 - 09:30	Jean-Marc	Fiorani	<i>IJL</i>	Analyse mathématique du Compound Energy Formalism (CEF) dans le cas de phases binaires à deux sous réseaux et présentant des défauts structuraux de type anti-site
09:30 - 09:50	Christian	Chatillon	<i>SIMAP</i>	Fonctionnement d'une Cellule d'effusion (Knudsen) et maîtrise des jets moléculaires à Haute Température
09:50 - 10:10	Yves	Bienvenu	<i>Centre des matériaux</i>	Metastabilité en fabrication additive (SLM) de superalliages à base de nickel, étude métallographique et ATD
10:10 - 10:30	Pierre	Benigni	<i>IM2NP</i>	Sources de données thermodynamiques pour les matériaux inorganiques

10:30 - 11:00 *pause*

modérateur : J.-C. Crivello

11:00 - 11:30	Christine	Guéneau	<i>CEA</i>	Etude thermodynamique du système Cs-O en couplant la méthode Calphad et des calculs ab-initio
11:30 - 11:50	Emmanuel	De Bilbao	<i>CEMHTI</i>	Cinétique de corrosion de réfractaires
11:50 - 12:00	Olivier	Dezellus	<i>univ-Lyon</i>	Réaction topochimique entre la phase MAX Ti ₃ SiC ₂ et le cuivre
12:00 - 12:30	Jacques	Rogez	<i>CNRS</i>	point sur le GDR

12:30 - 14:00 *repas du midi*

13:30 - 16:00 Réunion du bureau (restreinte aux membres du bureau)

Résumé des communications

1^{ère} réunion sur la Thermodynamique des Matériaux Haute Température
organisée par le GdR ThermaHT

16 et 17 Janvier 2014 - ICMPE (Thiais)

Mauro Palumbo - *ICAMS, Bochum (Allemagne)*

Achievements and challenges in first-principles calculations of temperature-dependent thermophysical properties

Several first-principles approaches for the computation of temperature-dependent properties in materials will be presented. These techniques are mostly based on density functional theory (DFT) and fundamental theories to include the effect of vibrational, electronic and magnetic excitations. Recent progress in the field and the availability of greater computational power have made it possible to obtain many materials properties from calculations, within a consistent approach and with an accuracy which is comparable to experimental techniques in most cases. In the high temperature regime, however, calculations require the evaluation of anharmonic and other effects which are still challenging and time consuming. Furthermore, some intrinsic limitations in DFT, which currently limit the accuracy of the calculations for some properties, still need to be addressed.

Ioana Nuta - *SIMAP, Grenoble*

Comportement des matériaux lors des cycles de brasure des ampoules à vide pour disjoncteur à moyenne tension

En cas de défaut sur le réseau électrique de moyenne tension, des disjoncteurs qui utilisent le vide comme milieu de coupure assurent la coupure du courant. Schneider Electric fabrique ces interrupteurs (appelés communément des ampoules). Une ampoule à vide est constituée de deux cylindres en alumine sur lesquels sont brasés des capots métalliques qui supportent un sous-ensemble fixe et un sous-ensemble mobile. Ces sous-ensembles se composent d'éléments brasés tels que des pastilles de contact, un soufflet en acier inoxydable 316L, un protège soufflet en acier inoxydable 304L et une électrode en cuivre. L'étude thermodynamique présentée cherche à évaluer en premier lieu les flux de matière évaporée ainsi que les limites d'oxydation des dépôts générés lors des cycles de brasure des ampoules à vide. La capacité de chaque pièce ainsi que des dépôts à stocker l'oxygène est ensuite évaluée en fonction de la pression résiduelle en espèces oxydées assurées par le système de pompage. L'impact de la teneur en oxygène du gaz de balayage (N_2) utilisé pour refroidir la charge d'un four de brassage sera aussi précisé.

Pascal Richet - *IPGP, Paris*

Propriétés vibrationnelles et configurationnelles des liquide à haute température :

Les propriétés thermodynamiques des liquides peuvent en général être divisées en contributions vibrationnelles et configurationnelles. Ces deux contributions représentent respectivement les réponses instantanées et retardées du liquide lors de changements imposés de conditions physiques. Cette distinction joue un rôle fondamental dans les descriptions thermodynamiques de l'état liquide. On en montrera cependant les limitations dans des certaines circonstances.

Christophe Drouet - *CIRIMAT, Toulouse*

Experimental and Predicted Thermodynamic Properties of Phosphate Apatite Minerals in view of Applicative Purposes

Apatite minerals are encountered in many domains including environment, medicine, geology, anthropology, cosmology, etc. However, the exploration of their thermodynamics has not received too much attention so far. In the first part of this contribution, an overview of published data (especially experimentally-based) will be summarized. This will include our recent measurements, for the first time, of heats of formation of biomimetic nonstoichiometric apatites (by way of high T drop solution calorimetry) which allowed us to draw conclusions on the evolution of apatite biominerals in bones and teeth. In the second part of the talk, we will evaluate the potential interest of predictive methods (first or fourth order-type methods) for estimating the energetics of apatitic compounds. A set of fitted parameters will be proposed, leading to estimates (within 0.5-1% of relative error) of the enthalpy and Gibbs free energy of formation (from the elements, at 298 K, 1 bar) as well as the standard entropy of apatite phosphate minerals. This predictive model has been also tested with success to the case of apatite solid-solutions as well as nonstoichiometric and/or hydrated specimens. Taking all these experimental and predictive data into account, it should become easier to access the thermodynamics of apatitic phosphates and to better understand or anticipate some behaviors observed in various application fields.

Alexandre Berche - *Univ Montpellier 2, Montpellier*

Couplage ab-initio / méthode Calphad : application au système Cr-Ge-Mn-Si

Parmi les matériaux ayant des propriétés thermoélectriques remarquables, les HMS (Higher Manganese Silicides) MnSi_x (x proche de 1.75) ont des figures de mérites (ZT) intéressantes pour des applications aux températures de l'ordre de 573K à 873K. De plus, il est possible d'augmenter encore le ZT de ce matériau par dopage au germanium ou au chrome. L'optimisation et l'élaboration de ces alliages passe par la connaissance du système quaternaire Cr-Ge-Mn-Si. Les systèmes ternaires constitutifs de Cr-Ge-Mn-Si se caractérisent par l'existence de nombreuses solutions solides continues. Des calculs DFT ont permis de déterminer les enthalpies de mélange dans ces solutions solides. Ces données ont alors été implémentées dans les descriptions Calphad des systèmes et les coupes isoplèthes correspondantes ont été comparées aux données expérimentales existantes.

Suzana Gomes Fries - *RUB, Bochum (Allemagne)*

The achievements of the Ringberg Unary Workshop

In the meeting last year in Marseille, I presented the preparation for the Ringberg Unary workshop. Five papers were produced during and after that which will be published after being reviewed and accepted for publication in the pssb january issue. I would like to report the conclusions about the perspectives of thermodynamic modelling obtained by this group of physicists, experimentalist and calphaders. A new platform is created.

Lionel Montagne - *GDR-Verres, Lille*

Présentation du GDR Verre

Pascal Piluso - *CEA, Cadarache*

Thermodynamique appliquée accidents graves de réacteurs nucléaires

En cas d'accidents graves de réacteurs nucléaires comme Fukushima, un mélange complexe formé des constituants des réacteurs, nommé corium, se forme. Plusieurs phénomènes peuvent se produire, certains à l'équilibre thermodynamique comme l'interaction corium béton, d'autres hors équilibre comme l'Interaction Corium Eau. Par ailleurs les bases de données thermodynamiques expérimentales intéressant les accidents graves restent à ce jour incomplètes.

Jacqueline Etay - *CNRS, Grenoble*

Présentation d'un dispositif expérimental de calorimétrie

Une bonne connaissance des propriétés thermophysiques d'alliages métalliques à l'état liquide est déterminante pour la maîtrise de leur élaboration. Leurs températures élevées de fusion ainsi que le haut degré de pureté nécessaire rendent ces mesures très délicates. L'utilisation de dispositif de lévitation électromagnétique (EML) en micropesanteur pour minimiser les mouvements à l'intérieur de l'échantillon liquide, est une solution possible pour pallier ces difficultés (programme ESA : ISS-Thermolab). Or, d'une part des simulations numériques ont montré que l'emploi d'un champ magnétique continu avait une influence similaire, voire meilleure, que celle de la gravité, et d'autre part, nous avons mis au point une procédure de pilotage de l'EML et d'analyse des signaux permettant d'améliorer la qualité des résultats obtenus et la rapidité de la mesure. Nous présenterons notre dispositif ainsi que des résultats de validation.

Nicolas Brisset - *Institut des Sciences Chimiques de Rennes, Rennes*

Étude du diagramme binaire U-Si

Le système U-Si, étudié de manière continue depuis les années 1940 (projet Manhattan), présente encore des incertitudes sur l'existence, la composition et les stabilités thermiques et chimiques de certaines phases intermédiaires. En particulier, le rôle des éléments légers (O, C, N) sous forme de traces sur les transformations thermodynamiques n'est que peu connu. Des analyses thermiques seront effectuées sur des échantillons issus de synthèses avec des taux d'impuretés mesurables par spectroscopie. La diffraction des rayons X, des électrons ou des neutrons permettra, grâce à des différences de contrastes, d'évaluer la teneur et la localisation des éléments légers au sein des structures. La présentation rappellera l'état actuel de la connaissance du diagramme, et listera les études envisagées. Cette étude étant principalement expérimentale, une approche théorique serait un réel apport à la compréhension du système.

Michal Strach - *IM2NP, Marseille*

In-situ high temperature X-ray diffraction study of the oxidation products and kinetics of uranium-plutonium mixed oxides up to 1773 K.

The oxidation products and kinetics of mixed uranium-plutonium dioxides containing 14, 24, 35, 46, 54 and 62% plutonium treated in air were studied by means of in-situ X-ray diffraction from 300 K to 1773 K every 100°. The obtained diffraction patterns were used to determine the temperature of the M_3O_8 (M-Metal) phase apparition. Based on a thorough analysis of the lattice parameter of the cubic phases we suggest the following oxidation sequence of $(U_{1-y}, Pu_y)O_{2+x}$: (i) $MO_2 \rightarrow M_4O_9$; (ii) $MO_2 \rightarrow M_4O_9 \rightarrow \gamma M_4O_9$; (iii) $\gamma M_4O_9 \rightarrow M_3O_8$. The behaviour of the orthorhombic M_3O_8 phase indicates that plutonium stabilizes the cubic phases during oxidation. Results were compared with chosen literature data and kinetic models established for UO_2 .

Natacha Bourgeois - *ICMPE-CNRS, Thiais*

Modélisation de systèmes métal-hydrogène

À côté des méthodes de stockage de l'hydrogène sous forme liquide et gazeuse, le stockage par absorption réversible dans des matériaux hôtes (hydrures) représente une voie prometteuse par sa sécurité et sa haute capacité volumique. Dans ce cadre, la modélisation thermodynamique des systèmes métal-hydrogène (M-H) constitue un enjeu majeur pour être capable de prédire et d'optimiser les caractéristiques d'un futur réservoir. Cette étude a pour objectif l'étude systématique de systèmes binaires M-H par une approche multi-échelle qui couple des calculs numériques (DFT, phonons) à la méthode de modélisation semi-empirique Calphad. Les stabilités de 17 structures cristallographiques potentielles dans 10 systèmes M-H ont été évaluées et comparées par calculs DFT des enthalpies de formation des hydrures. Pour chaque

système $M-H$, les (*groundstate*) ont été analysés et comparés à l'expérience. La dispersion des fréquences de vibration des atomes dans les structures du *groundstate* a été déterminée par calcul de phonons et les propriétés thermiques (entropie de vibration, capacité calorifique) en ont été déduites. Le système $Ni-H$ a été choisi pour faire l'objet d'une optimisation Calphad qui a permis d'avoir accès à son comportement thermodynamique et de construire des diagrammes de phases à des pressions difficilement accessibles en laboratoire.

Sébastien Bordier - *CEA, Saclay*

Modélisation thermodynamique des phases molybdates se formant lors de la vitrification des déchets nucléaires de haute activité.

Tam Ngoc Pham Thi - *CEA, Cadarache*

Study of the binary system Cs-Te

Cesium and Tellurium are important fission products formed in a nuclear fuel during irradiation. Due to their fission yield values ($Cs : Te = 3 : 1$), cesium telluride Cs_2Te is considered to be one of the most stable product compounds in the fuel-cladding gap. Therefore, thermodynamic properties of Cs_2Te were extensively studied in the literature. In this work, we present the review of phase diagram, crystallographic data and thermodynamic data of Cs-Te binary system. The thermodynamic modelling of the Cs-Te binary system is also performed with the aid of software Thermo-Calc. The thermodynamic data derived in this work based on the databases of Scientific Group Thermodata European (SGTE) and TBASE (ECN, Petten, Netherland) for the pure elements and the gaseous species. The compound formation and liquid mixing Gibbs energy expressions are obtained by the least square optimization program PARROT. Comparisons between calculated and experimental results are presented. A satisfactory agreement is achieved.

Maya Cherif - *CNRS SIMAP, Grenoble*

Étude des céramiques eutectiques à base d'oxydes réfractaires

Les propriétés mécaniques haute température des céramiques eutectiques à base d'oxydes réfractaires obtenues par solidification dirigée en font des candidates potentielles pour les matériaux de structure. Leurs microstructures "3D imbriquée" restent encore inexplicables (relation entre les propriétés physiques et les paramètres d'élaboration). Afin de définir, les caractéristiques de ces matériaux, il est nécessaire de connaître les grandeurs physico-chimiques et thermodynamiques à haute température.

Jean-Marc Fiorani - *IJL, Nancy*

Analyse mathématique du Compound Energy Formalism (CEF) dans le cas de phases binaires à deux sous réseaux et présentant des défauts structuraux de type anti-site

A partir d'une analyse mathématique du Compound Energy Formalism (CEF), nous montrons comment il est possible d'obtenir des paramètres indépendants pour la modélisation de phases binaires à deux sous réseaux qui présentent des défauts structuraux de type anti-site.

Christian Chatillon - *SIMAP, Grenoble*

Fonctionnement d'une Cellule d'effusion (Knudsen) et maîtrise des jets moléculaires à Haute Température

Les cellules d'effusion dites cellules de Knudsen sont utilisées en recherche fondamentale pour déterminer des pressions de vapeur dans le domaine des hautes températures (origine Knudsen 1904) mais aussi de plus en plus pour suivre des processus cinétiques. Par ailleurs dans l'industrie des matériaux les fours d'élaboration sous vide sont de plus en plus similaires à ces cellules car cela permet de mieux contrôler les procédés. Dans cet exposé nous présentons

les modes de fonctionnement des cellules et spécialement l'ensemble des processus pouvant se produire à haute température et qui mènent à la formation d'un jet moléculaire sur lequel des mesures de pression vont se faire. Le couplage avec un appareil de mesure comme un spectromètre de masse est ensuite analysé en vue de la maîtrise de chacun des processus observés

Yves Bienvenu - *Centre des matériaux, Paris*

Metastabilité en fabrication additive (SLM) de superalliages a base de nickel, étude métallographique et ATD

Pierre Benigni - *IM2NP, Marseille*

Sources de données thermodynamiques pour les matériaux inorganiques

Les compilations bibliographiques de données thermodynamiques pour les matériaux inorganiques sont très diverses. Cette fragmentation trouve son origine dans la variété des communautés de chercheurs académiques et/ou industriels ayant procédé à leur établissement. Une revue des compilations classiques de données thermochimiques sera présentée depuis les systèmes unaires jusqu'aux systèmes multiconstitués. Seront abordés à la fois les données thermodynamiques des phases solide, liquide et gaz et les diagrammes d'équilibres entre phases.

Christine Guéneau - *CEA, Saclay*

Etude thermodynamique du système Cs-O en couplant la méthode Calphad et des calculs ab-initio

Le Césium est un produit de fission qui se forme dans les combustibles oxydes UO_2 et $(\text{U,Pu})\text{O}_2$. Le système Cs-O est donc important à modéliser pour prédire les phases se formant dans le combustible irradié. Nous présentons la modélisation thermodynamique du système Cs-O par la méthode Calphad. Ce modèle s'appuie sur les données expérimentales disponibles dans la littérature ainsi que sur des calculs ab-initio qui ont permis à l'aide d'un modèle de thermodynamique statistique de calculer les enthalpies libres de tous les oxydes de césium.

Emmanuel De Bilbao - *CEMHTI-CNRS, Orléans*

Cinétique de corrosion de réfractaires

Les céramiques et les bétons réfractaires sont utilisés dans les procédés haute température et les nouvelles énergies pour former une barrière chimique et protéger la structure. Leur endommagement provient, entre autre, d'une corrosion par les laitiers ou par les gaz et correspond à un mécanisme d'imprégnation réactive. Pour optimiser le design des réfractaires et améliorer leur comportement, la simulation numérique est devenue un outil précieux à condition de connaître les cinétiques des phénomènes. Cette communication présente les derniers résultats de nos tentatives d'identification des cinétiques de corrosion d'une alumine par un laitier alumino-calcique.

Olivier Dezellus - *Université Lyon 1, Lyon*

Réaction topochimique entre la phase MAX Ti_3SiC_2 et le cuivre

Les phases MAX sont des composés à structure lamellaire dans lesquelles les blocs unitaires de formule M_{n+1}X_n sont séparés par des couches d'éléments n .

Il a récemment été démontré qu'il est possible lors d'attaque chimique en solution aqueuse d'exfolier les éléments A et d'obtenir ainsi des feuillets apparentés à du graphène.

A haute température aussi des réactions de type intercalation/désintercalation au niveau des feuillets A semblent possible et nous l'avons mis en évidence pour des éléments comme Ag et Cu. Ces résultats nous amène à nous interroger sur la stabilité de ces composés et des structures apparentées.

16 et 17 Janvier 2014 - ICMPE (Thiais)

1^{ère} réunion sur la Thermodynamique des Matériaux Haute Température organisée par le GdR ThermaHT

Liste des participants

nom	prénom	affiliation	lieu	mail	jeudi	dîner	vendredi	
1	Alpettaz	Thierry	CEA	Saclay	thierry.alpettaz@cea.fr	oui	non	non
2	Andrieux	Jerome	Univ Lyon 1, LMI	Lyon	jerome.andrieux@univ-lyon1.fr	oui	oui	oui
3	Antoni	Annie	SIMAP - INP	Grenoble	aantoni@simap.grenoble-inp.fr	oui	oui	oui
4	Barrachin	Marc	IRSN	St Paul lez Durance	marc.barrachin@irsn.fr	oui	oui	oui
5	Benigni	Pierre	IM2NP	Marseille	p.benigni@univ-amu.fr	oui	oui	oui
6	Berche	Alexandre	Univ Montpellier 2	Montpellier	alexandre.berche@gmail.com	oui	oui	oui
7	Bienvenu	Yves	Centre des matériaux	Paris	yves.bienvenu@mines-paristech.fr	oui	pê	oui
8	Bordier	Sébastien	CEA	Saclay	sebastien.bordier@cea.fr	oui	non	oui
9	Bourgeois	Natacha	ICMPE-CNRS	Thiais	natacha.bourgeois@ensam.eu	oui	oui	oui
10	Brisebourg	Mathieu	LCTS	Bordeaux	brisebourg@lcts.u-bordeaux1.fr	oui	oui	oui
11	Brisset	Nicolas	Institut des Sciences Chimiques de Rennes	Rennes	nicolas.brisset.1@univ-rennes1.fr	oui	oui	oui
12	Chatain	Sylvie	CEA	Saclay	sylvie.chatain@cea.fr	oui	non	non
13	Chatillon	Christian	SIMAP	Grenoble	christian.chatillon@simap.grenoble-inp.fr	oui	oui	oui
14	Cherif	Maya	CNRS SIMAP	Grenoble	maya.cherif@simap.grenoble-inp.fr	oui	oui	oui
15	Crivello	Jean-Claude	ICMPE-CNRS	Thiais	crivello@icmpe.cnrs.fr	oui	oui	oui
16	David	Nicolas	IJL	Nancy	nicolas.david@univ-lorraine.fr	oui	oui	oui
17	De Bilbao	Emmanuel	CEMHTI-CNRS	Orléans	emmanuel.debilbao@univ-orleans.fr	oui	oui	oui
18	Decreton	Alexandre	IRSN	St Paul lez Durance	alexandre.decreton@irsn.fr	oui	non	oui
19	Dezellus	Olivier	Université Lyon 1	Lyon	olivier.dezellus@univ-lyon1.fr	oui	oui	oui
20	Drouet	Christophe	CIRIMAT	Toulouse	christophe.drouet@ensiacet.fr	oui	oui	oui
21	Dupin	Nathalie	Calcul thermodynamique	Orcet	nathdupin@wanadoo.fr	oui	oui	oui
22	Etay	Jacqueline	CNRS	Grenoble	jacqueline.elay@grenoble-inp.fr	oui	oui	oui
23	Fiorani	Jean-Marc	IJL	Nancy	Jean-Marc.Fiorani@univ-lorraine.fr	oui	oui	oui
24	Floury	Paul	IPGP	Paris	floury@ipgp.fr	oui	non	oui
25	Gabriel	Armand	Rio Tinto Alcan	Voreppe	Armand.Gabriel@riotinto.com	oui	non	oui
26	Gomes Fries	Suzana	RUB	Bochum (DE)	suzana.g.fries@rub.de	oui	oui	pê
27	Gossé	Stéphane	CEA	Saclay	stephane.gosse@cea.fr	oui	oui	oui
28	Guéneau	Christine	CEA	Saclay	christine.gueneau@cea.fr	oui	oui	oui
29	Guillemet-Fritsch	Sophie	CNRS/CIRIMAT	Toulouse	guillem@chimie.ups-tlse.fr	oui	non	non
30	Joubert	Jean-Marc	ICMPE-CNRS	Thiais	joubert@icmpe.cnrs.fr	oui	oui	oui

31	Lacaze	Jacques	CIRIMAT	Toulouse	jacques.lacaze@ensiacet.fr	oui	non	oui
32	Lomello	Marc	Université Savoie	Annecy	marc.lomello@univ-savoie.fr	oui	oui	oui
33	Martin	Guillaume	CEA	Cadarache	guillaume.martin@cea.fr	oui	non	oui
34	Montagne	Lionel	GDR-Verres	Lille	lionel.montagne@univ-lille1.fr	oui	oui	oui
35	Montagnon	Jacques	ERAMET RESEARCH		jacques.montagnon@erametgroup.com	oui	oui	oui
36	Neuville	Daniel	CNRS-IPGP	Paris	neuville@ipgp.fr	oui	oui	oui
37	Nuta	Ioana	SIMAP	Grenoble	ioana.nuta@simap.grenoble-inp.fr	oui	oui	oui
38	Palumbo	Mauro	ICAMS	Bochum (DE)	mauro.palumbo@rub.de	oui	oui	oui
39	Pham Thi	Tam Ngoc	CEA	Cadarache	phamtamngoc@yahoo.fr	oui	oui	oui
40	Piluso	Pascal	CEA	Cadarache	pascal.piluso@cea.fr	oui	non	non
41	Pisch	Alexander	Lafarge LCR		alexander.pisch@lafarge.com	oui	oui	non
42	Quaini	Andrea	CEA	Saclay	andrea.quaini@cea.fr	oui	non	oui
43	Rapaud	Olivier	SPCTS	Limoges	olivier.rapaud@unilim.fr	oui	oui	oui
44	Richet	Pascal	IPGP	Paris	richet@ipgp.fr	oui	oui	oui
45	Rogez	Jacques	CNRS	Marseille	j.rogez@univ-amu.fr	oui	oui	oui
46	Samer	Nassim	Université Lyon 1	Lyon	nassim.samer@univ-lyon1.fr	oui	oui	oui
47	Schuller	Sophie	CEA	Marcoule	sophie.schuller@cea.fr	oui	oui	oui
48	Strach	Michal	IM2NP	Marseille	jukcyn@gmail.com	oui	oui	oui
49	Tandjaoui	Amina	CNRS SIMAP-EPM	Grenoble	amina.tandjaoui@simap.grenoble-inp.fr	oui	oui	oui
50	Tedenac	Jean-Claude	Univ Montpellier 2	Montpellier	tedenac@univ-montp2.fr	oui	oui	oui
51	Teyssandier	Francis	CNRS/LCTS	Bordeaux	teyssandier@lcts.u-bordeaux1.fr	oui	oui	oui
52	Toffolon-masclat	Caroline	CEA	Saclay	caroline.toffolon@cea.fr	oui	non	oui
53	Tougait	Olivier	Institut des Sciences Ch Rennes		tougait@univ-rennes1.fr	oui	oui	oui
54	Touzo	Bruno	Kerneos		bruno.touzo@kerneos.com	oui	oui	oui