



# SOCIETE FRANÇAISE DE THERMIQUE

**Groupe «Mode de Transfert –Rayonnement»** sous le patronage du  
**ACCORT et du GDR MODMA**

Journée Thématique organisée par : *Benoît ROUSSEAU et Florent BOUCHER*

**Mardi 11 octobre 2016**

(Accueil à partir de 9h30)

à

Espace Hamelin, 17 rue Hamelin, Paris 16 (métro Boissière ou Iéna)



\*\*\*\*\*

## ***Simulation numérique des propriétés thermo-radiatives des matériaux : apport des approches ab initio et atomistiques***

Cette journée SFT, initiée par les GDR ACCORT et MODMAT, a pour but de faire un point sur l'intérêt des approches ab initio (Théorie de la Fonctionnelle de la Densité,...), et atomistiques (Dynamique Moléculaire,...) pour la détermination des propriétés thermo-radiatives des matériaux en conditions réelles d'usage. Ces approches, requérant au préalable de connaître l'organisation de la matière à l'échelle atomique, font aujourd'hui l'objet d'un fort développement tant en chimie du solide qu'en physique de la matière condensée. Les méthodes ab initio permettent de reproduire ainsi les propriétés optiques de divers composés (TiO<sub>2</sub> par exemple) pour un domaine spectral couvrant le visible et l'Ultra-Violet. Les méthodes atomistiques sont plus connues pour calculer les conductivités thermiques dues aux vibrations de réseau ce qui ouvre la porte au calcul des propriétés radiatives dans l'infrarouge lointain. Est-il envisageable de concevoir une démarche novatrice permettant de reproduire les propriétés thermo-radiatives pour la gamme spectrale du rayonnement thermique en partant de ces approches « phononiques » et « électroniques » ? La journée vise donc à réunir théoriciens, modélisateurs et expérimentateurs exerçant leurs activités aujourd'hui aux frontières de disciplines telles que la chimie, la physique, la thermique, la combustion ou encore le génie des procédés. Cette journée se proposera de dresser des pistes de coopérations futures dans le souci de développer des méthodes numériques multi-échelles robustes permettant d'accélérer la mise en œuvre de nouveaux matériaux à propriétés thermo-radiatives contrôlées : conversion de l'énergie solaire, management thermique, optimisation de procédés de formage, lutte contre les incendies,...

**----- BULLETIN D'INSCRIPTION -----**

à retourner impérativement par courrier à : *Secrétariat SFT - ENSEM – TSA 60604 – 54518 Vandoeuvre Cedex*  
ou par fax : *03 83 59 55 44* ou par mail : *sft-contact@asso.univ-lorraine.fr*

Nom ..... Prénom .....

Organisme .....

Adresse .....

..... mail.....

\*o conférencier.

\*o membre SFT à titre individuel.

\*o membre adhérent à la SFT par l'appartenance à :  
(cachet et signature de la société adhérente)

\*o non-membre de la SFT

*désire s'inscrire à la journée d'étude SFT du 11 Octobre 2016*

conférencier : 40 Euros    membre SFT: 80 Euros    non-membre: 150 Euros

(ce prix inclut le repas de midi qui est organisé sur place, les pauses et les textes)

\*o ci-joint le règlement par chèque à l'ordre de la *Société Française de Thermique*  
(une facture acquittée vous sera retournée)

\*o je demande à ma société de vous adresser le bon de commande correspondant à cette inscription.

L'inscription est considérée comme acquise et comme due dès lors du renvoi de ce bulletin au secrétariat SFT .

(\* cocher les deux mentions utiles)

Signature :

**Le repas ne peut être garanti qu'aux personnes s'inscrivant au moins 10 jours avant la rencontre**

**Contacts :**

**Benoit ROUSSEAU** / LTN UMR 6607, 0663287203, [benoit.rousseau@univ-nantes.fr](mailto:benoit.rousseau@univ-nantes.fr)

**Florent BOUCHER** / IMN UMR 6502, 0240373924, [florent.boucher@cnrs-imm.fr](mailto:florent.boucher@cnrs-imm.fr)

**Programme de la journée**

(version provisoire en cours de construction)