



## Offre de Post-doctorat 12 mois - Lyon - France Étude numérique de la plasticité des alliages à haute entropie

Mots-clés : alliages à haute entropie, calculs atomistiques, dynamique des dislocations, plasticité cristalline.

Un poste de post-doctorant d'un an est à pourvoir à partir du mois de Juin 2019 (flexible) au sein du laboratoire Mateis de l'INSA de Lyon. Le projet portera sur l'étude numérique de la plasticité des alliages à haute entropie de structure cubique à faces centrées. Ces nouveaux alliages sont composés de plusieurs éléments en solution solide qui créent un désordre local faisant obstacle au mouvement des dislocations, conduisant à des propriétés mécaniques intéressantes. Toutefois, les mécanismes fondamentaux du comportement plastique de ces alliages restent à être clarifiés. Ce projet consiste à développer une approche multi-échelles quantitative (simulations atomistiques et modèles continus) afin d'étudier les interactions entre les dislocations et leur environnement atomique local. Une attention particulière sera apportée à l'influence de la distribution des éléments d'alliages (corrélations spatiales) sur les propriétés de l'alliage (limite d'élasticité, influence de la température). Ce travail sera effectué en collaboration avec David Rodney (ILM, Univ. Lyon).

Dans un premier temps, la combinaison de calculs analytiques élastiques et de simulations de statique moléculaire permettront de caractériser l'influence d'une distribution aléatoire d'atomes sur la forme d'équilibre d'une dislocation. Le paramétrage quantitatif d'un modèle de dynamique des dislocations à partir des simulations atomistiques permettra ensuite d'étudier la progression quasi-statique d'une dislocation dans un tel environnement et de caractériser la limite d'élasticité de l'alliage à 0K. Par la suite, on s'attachera au comportement en température et à l'influence des fluctuations thermiques sur la plasticité de l'alliage.

Le travail du post-doctorant consistera à développer les différents outils analytiques et numériques que requiert cette étude et de réaliser les simulations numériques, en s'appuyant sur l'expertise des encadrants en simulations atomistiques pour les dislocations et en physique statistique. Le candidat devra être titulaire d'un doctorat en science des matériaux ou en physique de la matière condensée. Ce poste convient à un candidat possédant une bonne expérience en simulations numériques et des bases de physique statistique. Également, des bonnes notions de programmation (C++ ou Fortran) seront appréciées.

Dates: 1 an à partir de juin 2019 (date de début de contrat flexible)

Lieu: Laboratoire MATEIS / Metal (INSA de Lyon - France)

Salaire: ~ 2000€ net/mois.

Contacts:

- Pierre-Antoine Geslin, [pierre-antoine.geslin@insa-lyon.fr](mailto:pierre-antoine.geslin@insa-lyon.fr) – Mateis METAL, INSA Lyon.

- David Rodney, [david.rodney@univ-lyon1.fr](mailto:david.rodney@univ-lyon1.fr) – Institut Lumière Matière, Univ. Lyon I.

N'hésitez pas à nous contacter pour toute question relative au projet. Si intéressé-e par le poste, merci de nous faire parvenir un CV détaillé et une lettre de motivation.

**Post-Doctoral position**  
**12 months - Lyon - France**  
**Numerical study of plasticity of high entropy alloys**

Keywords : high entropy alloys, atomistic calculations, dislocation dynamics, crystal plasticity.

A 1-year post-doctoral position is opening from June 2019 (flexible) in Mateis lab at INSA Lyon. The research project focuses on the numerical study of plasticity of high entropy face-centered cubic alloys. These recently developed alloys are composed of several elements in solid solution, creating a local disorder impeding the movement of dislocations, which leads to interesting mechanical properties. However, the fundamental mechanisms of the plastic behavior of these alloys remain to be clarified. This research project consists in developing a quantitative multi-scale approach (atomistic simulations and continuous modeling) in order to investigate the interactions between dislocations and their local environment. A special attention will be brought to the influence of the distribution of the alloying elements (spatial correlations) on the alloys properties (yield stress, influence of temperature). This work will be conducted in collaboration with David Rodney (ILM, Univ. Lyon).

In a first step, a combination of analytical calculations and atomistic simulations will clarify the influence of a random distribution of atoms on the equilibrium shape of a dislocation. Quantitative parametrization of a higher scale dislocation dynamics model from atomistic calculations will allow to investigate the progression of dislocations in such a disorder environment and to deduce the yield stress of the alloy at 0K. Next, we will focus on the plastic behavior of the alloy in temperature, when thermal fluctuations come into play.

The post-doctoral fellow's work will consist in developing the different analytical and numerical tools necessary to this study as well as realizing the numerical simulations, while relying on the advisors' expertise of atomistic simulations of dislocations and statistical physics. The candidate will have to hold a PhD degree in material science or condensed matter physics. A good experience in numerical simulations and knowledge of statistical physics will be preferred for this position. Also, good programming skills will be appreciated.

Dates: 1 year from June 2019 (flexible)

Place: MATEIS / Metal laboratory (INSA de Lyon - France)

Salary: ~ 2000€ net/mois.

Contacts:

- Pierre-Antoine Geslin, [pierre-antoine.geslin@insa-lyon.fr](mailto:pierre-antoine.geslin@insa-lyon.fr) – Mateis METAL, INSA Lyon.

- David Rodney, [david.rodney@univ-lyon1.fr](mailto:david.rodney@univ-lyon1.fr) – Institut Lumière Matière, Univ. Lyon I.

Don't hesitate to contact us directly to ask any questions related to the research project. If interested by the position, please send a detailed resume and a motivation letter.