

Sujet de stage: Etude par dynamique moléculaire des interfaces tétragonal/monoclinique dans la zircono cériée.

Encadrants : Pierre-Antoine Geslin (Mateis, INSA Lyon), David Rodney (ILM, Univ. Lyon 1)

Contact : pierre-antoine.geslin@insa-lyon.fr

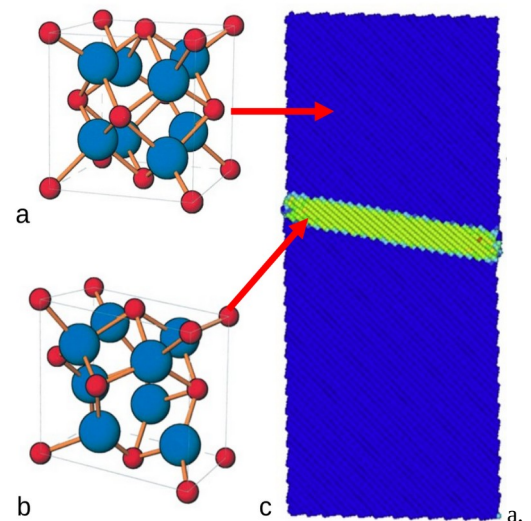
Lieu du stage: Laboratoire MATEIS (INSA-Lyon)

Mots-clés: zircono, mécanique, simulations numériques, dynamique moléculaire

Durée : 6 mois (Mars-Septembre 2024)

Indemnité : 600 euros / mois (provenant d'un projet ANR)

La zircono est un matériau céramique qui possède des propriétés mécaniques prometteuses : alors que la plupart des céramiques sont fragiles, les transformations entre phases tétraogonales et monocliniques dans la zircono (voir figure ci-contre) permettent d'accomoder les contraintes et ainsi d'augmenter l'allongement à rupture de ces matériaux. Toutefois, les propriétés énergétiques et cinétiques des interfaces entre phases tétraogonales et monocliniques restent encore mal connues, ce qui constitue un verrou scientifique à l'étude et au développement de ces matériaux. Dans ce projet de master, nous envisageons d'utiliser un potentiel interatomique de type *machine learning* récemment développé pour étudier le comportement de ces interfaces en dynamique moléculaire (voir figure ci-contre). L'étude des fluctuations thermiques de ces interfaces permettra de caractériser leur énergie ainsi que leur mobilité en fonction de leur orientation.



Zircono tétraogonale (tiré de [1]).

b. Zircono monoclinique [1].

c. Transformation de phase dans une simulation de dynamique moléculaire (tiré de [2])

Cette étude se décompose en plusieurs étapes :

- Effectuer des simulations de dynamique moléculaire d'interfaces.
- Analyser les fluctuations de ces interfaces grâce à une méthode spectrale (transformées de Fourier) en suivant des travaux précédents [3]
- En déduire les énergies et les mobilités des interfaces en fonction de leur orientation et de la température.

Ces résultats serviront à rationaliser les morphologies des zones transformées observées expérimentalement par des chercheurs prenant part au projet.

Pour ce projet, nous sommes à la recherche d'un·e étudiant·e ayant suivi des cours de physique de la matière condensée et/ou de sciences de matériaux (cristallographie, mécanique, transformations de phases) et ayant un goût pour le numérique.

Références :

[1] Mamivand, M. et al. (2013). *Acta Materialia*, 61(14), 5223-5235.

[2] Zhang, N., & Zaeem, M. A. (2016). *Acta Materialia*, 120, 337-347.

[3] Geslin, P. A., & Rodney, D. (2018). *Physical Review B*, 98(17), 174115.

Internship topic: Molecular dynamics study of tetragonal/monoclinic interfaces in ceriated zirconia.

Advisors : Pierre-Antoine Geslin (Mateis, INSA Lyon), David Rodney (ILM, Univ. Lyon 1)

Contact : pierre-antoine.geslin@insa-lyon.fr

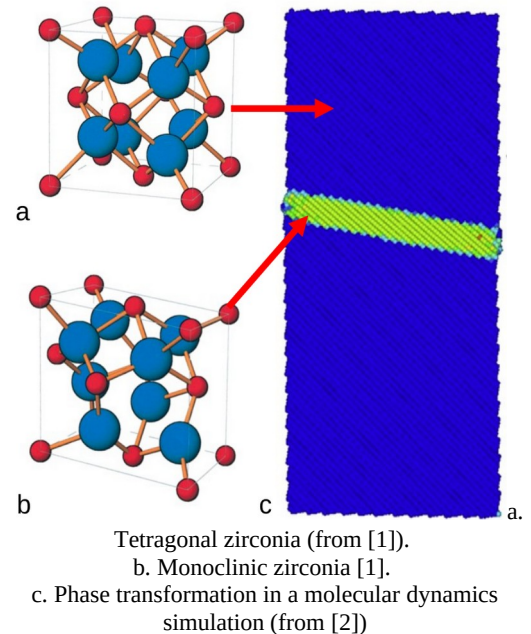
Location: MATEIS Laboratory (INSA-Lyon)

Keywords: zirconia, mecanics, numerical simulations, molecular dynamics

Duration : 6 months (March-Septembre 2024)

Compensation : 600 euros/months (from an ANR project)

Zirconia is a ceramic material holding promising mechanical properties: while most ceramics are fragile, the transformations between tetragonal and monoclinic phases in zirconia (see figure) allow to accommodate stresses and thus increase the elongation at break of these materials. However, the energetic and kinetic properties of the interfaces between tetragonal and monoclinic phases remain poorly understood, which constitutes a scientific obstacle in the study and development of these materials. In this master's project, we plan to use a recently developed machine learning interatomic potential to study the behavior of these interfaces in molecular dynamics (see figure). The study of the thermal fluctuations of these interfaces allow to characterize their energy as well as their mobility depending on their orientation.



This study is broken down into several steps:

- Perform molecular dynamics simulations of interfaces between tetragonal and monoclinic phases.
- Analyze the fluctuations of these interfaces using a spectral method (Fourier transforms) following previous work [3]
- Deduce the temperature and orientation-dependent energies and mobilities of the interfaces.

These results will be used to rationalize the morphologies of the transformed zones observed experimentally by colleagues of the project.

For this project, we are looking for a student with a background in condensed matter physics and/or materials sciences (crystallography, mechanics, phase transformations) and who has a strong taste for numerical studies.

References:

[1] Mamivand, M. et al. (2013). *Acta Materialia*, 61(14), 5223-5235.
 [2] Zhang, N., & Zaem, M. A. (2016). *Acta Materialia*, 120, 337-347.
 [3] Geslin, P. A., & Rodney, D. (2018). *Physical Review B*, 98(17), 174115.