

Sujet de thèse : Etude de la plasticité des alliages à haute entropie par simulations atomistiques et continues.

Encadrants : Pierre-Antoine Geslin⁽¹⁾, David Rodney⁽²⁾

(1) MATEIS, INSA-Lyon, Equipe Métal, 23 Avenue Jean Capelle, 69621 Villeurbanne.

(2) IML, Université Lyon 1, 6 rue Ada Byron, 69622 Villeurbanne.

Mots-clés : métallurgie physique, simulations numériques, dynamique moléculaire, approche multi-échelles.

Durée : 3 ans (10/2021 - 10/2024).

Financement : thèse financée par l'ANR.

Lieu : Laboratoire MATEIS, Equipe METAL, 23 Avenue Jean Capelle, 69621 Villeurbanne.

Contact : Pierre-Antoine Geslin (pierre-antoine.geslin@insa-lyon.fr)

Les alliages à haute entropie (HEA) constituent une nouvelle classe de matériaux en plein développement et sont considérés comme les matériaux du futur du fait de leurs excellentes propriétés mécaniques. Contrairement aux alliages conventionnels composés d'un élément principal et d'autres espèces en faible concentration, les HEA sont composés de plusieurs éléments en proportions comparables. En particulier, les HEA de structure cubique centrée composés d'éléments réfractaires tels que $Ta_{25}Nb_{25}Mo_{25}W_{25}$ conservent d'excellentes propriétés à haute température et sont envisagés pour remplacer les alliages à base nickel dans les secteurs aéronautiques et nucléaires. Toutefois, la présence d'impuretés telles que l'oxygène ou le carbone qui se placent sur les sites interstitiels de ces alliages conduit à une forte augmentation de la limite d'élasticité et à une chute drastique de la ductilité. La dépendance de ces propriétés mécaniques avec le taux d'interstitiels est donc un point crucial à éclaircir pour envisager l'utilisation de ces alliages pour des applications industrielles.

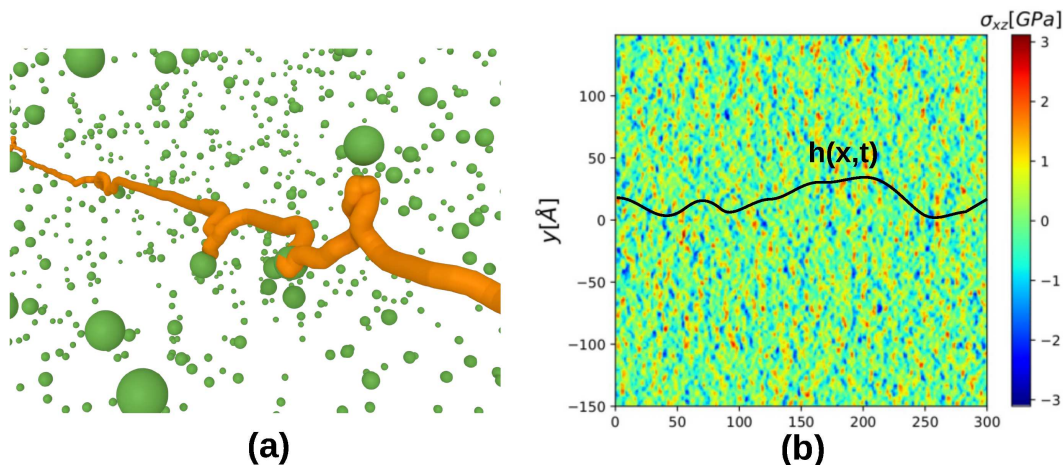


FIGURE 1 – (a) Dislocation vis (orange) interagissant avec des atomes de carbone (en vert) dans du fer cubique centré (non représenté). (b) Modélisation continue d'une dislocation comme une ligne élastique interagissant avec un champ de contraintes issu d'atomes de soluté.

Dans ce projet de thèse, nous proposons d'étudier les interactions entre dislocations (vecteurs de la déformation plastique) et les atomes de soluté au moyen d'une approche numérique multi-échelles. Dans un premier temps, le(la) candidat(e) étudiera le comportement des dislocations (vis et coin) dans un alliage HEA au moyen de simulations de dynamique moléculaire qui permettent de capturer les détails des interactions atomiques (voir par exemple Fig. 1.a). La dynamique moléculaire permettra aussi d'éclaircir le rôle de solutés interstitiels sur le comportement de la dislocation. Toutefois, cette technique reste limitée à des échelles d'espace et de temps limitées qui ne sont pas représentatives de l'expérience. C'est pourquoi la deuxième étape de la thèse se concentre sur le développement

d'une approche élastique dans laquelle la dislocation est représentée comme une ligne élastique interagissant avec un champ de contrainte issu des atomes de solutés comme présenté schématiquement sur la Fig. 1.b. Ce modèle continu sera paramétré avec soin à partir des calculs atomistiques afin de rester quantitatif. L'objectif de cette thèse consiste à utiliser cette approche continue afin de prédire la limite d'élasticité de l'alliage en fonction de sa composition, de la température et la vitesse de déformation. La comparaison de ces résultats à des données expérimentales issues de la littérature permettra la validation de notre approche.

Le travail du(de la) candidat(e) consistera tout d'abord à réaliser des simulations de dynamique moléculaire en prenant en main le code *Lammps*, et à les analyser grâce à des outils de visualisation et de des scripts d'analyse. Une partie conséquente du travail du(de la) candidat(e) consistera ensuite à développer le code du modèle continu écrit en C++ permettant et à le paramétrer à partir des simulations atomistiques. A chaque étape, les résultats seront comparés aux travaux numériques et expérimentaux décrits dans la littérature afin de valider ou d'améliorer la démarche multi-échelles.

Nous recherchons un(e) candidat(e) avec le profil suivant :

- Master 2 Recherche ou école d'ingénieur en fin de cursus Sciences des Matériaux, Mécanique ou Physique de la Matière Condensée.
- Des connaissances approfondies en métallurgie physique (dislocations, mécanismes de durcissement) seront considérées comme un plus.
- Étant donné le caractère numérique du sujet, un intérêt pour les outils informatiques et la programmation est préférable. Des notions en Linux, Python et C++ seront considérées comme un plus.

Si vous êtes intéressé par ce sujet de thèse, merci d'envoyer votre candidature à pierre-antoine.geslin@insa-lyon.fr en y joignant

- CV.
- Lettre de motivation.
- Dernier relevé de notes de Master ou de cursus ingénieur.