

Sujet de thèse

(english version below)

Modélisation de la plasticité induite par transformation dans la zircone par calculs de structure électronique et potentiels *machine learning*

Les céramiques sont des matériaux à très fort potentiel pour des applications en environnements hostiles, notamment à haute température et corrosifs. Cependant, leur utilisation reste limitée à cause de leur faible ductilité. Une révolution est survenue avec la découverte dans des céramiques à base de zircone d'une plasticité induite par transformation martensitique (ou effet TRIP en anglais). L'objectif de la thèse est d'étudier les mécanismes à l'échelle atomique de la transformation martensitique dans une céramique récemment identifiée, faite de zircone dopée au cérium. Nous désirons développer une approche théorique qui commencera par des calculs de structure électronique pour étudier à l'échelle d'une centaine d'atomes (une supercellule) le chemin de transformation. Ces calculs serviront à ajuster un potentiel interatomique de type Réseau de Neurones pour permettre des simulations de type dynamique moléculaire à une plus grande échelle. Une question clé est de savoir dans quelles conditions géométriques et de sollicitation une zone transformée peut traverser un joint de grains sans l'endommager.

Ce travail est réalisé dans le cadre du projet NANOTRIP financé par l'a ANR impliquant des théoriciens et des expérimentateurs de l'université de Lyon, de l'INSA de Lyon et d'Aix-Marseille Université. L'Institut Lumière Matière de l'Université de Lyon est principalement en charge de la partie théorique où se déroulera la thèse. Nous recherchons un-e candidat-e motivé-e par un travail théorique avec des connaissances fortes en physique du solide et/ou en modélisation des matériaux. La personne recrutée pourra aussi participer aux expériences qui se dérouleront notamment au synchrotron de Grenoble afin de suivre in-situ la transformation dans des échantillons sous compression.

Pour toute information et candidature, merci de vous adresser à :

- David Rodney (david.rodney@univ-lyon1.fr)
- Tristan Albaret (tristan.albaret@univ-lyon1.fr)
- Jonathan Amodeo (jonathan.amodeo@cnsr.fr)

PhD topic

Transformation induced plasticity in zirconia alloys by first principle and machine learning potential simulations

Ceramics are particularly interesting materials for applications in harsh and high-temperature environments. However, their usage remains constrained due to their lack of ductility. A new route opens with the discovery of zirconia-based alloys that benefit from a Transformation-Induced plasticity (TRIP) behavior that improves their mechanical properties. The goal of the thesis is to investigate the martensitic transformation at the atomic scale in a zirconia alloy doped with ceria. We would like to develop an original theoretical approach that will start with first-principles calculations focusing on the phase transformation path in a simulation supercell of a few hundred atoms. These simulations will then be used to fit a neural network potential useful to perform molecular dynamics simulations at a larger scale. One of the key points will be to identify the geometrical configurations required for the non-destructive propagation of transformed zones through grain boundaries.

This study takes place in the context of the NANOTRIP ANR project that relies on theoreticians and experimentalists from Univ Lyon, INSA-Lyon and Aix-Marseille University in France. The PhD project will take place at the Institut Lumière Matière at Univ Lyon which is mainly in charge of the theoretical part of the project. We are looking for a motivated candidate with a strong background in physics or computational materials sciences. In addition to his/her modeling tasks, the hired candidate will also have the opportunity to participate to the experiments that will take place at the Grenoble synchrotron to follow in situ the zirconia phase transformation under compression.

For any information on the project or to apply, please contact:

- David Rodney (david.rodney@univ-lyon1.fr)
- Tristan Albaret (tristan.albaret@univ-lyon1.fr)
- Jonathan Amodeo (jonathan.amodeo@cncs.fr)