

Stage de M2 : Etude du rôle de l'oxygène sur la plasticité des alliages à haute entropie par simulation à l'échelle atomique.

Encadrants : Arnaud Allera, Michel Perez, David Rodney, Pierre-Antoine Geslin.

Mots-clés : métallurgie physique, plasticité, simulations numériques, dynamique moléculaire.

Durée : 6 mois (Mars - Août 2020). Possibilité de poursuivre en thèse de doctorat financée par l'ANR.

Indemnité : ~ 500 euros/mois

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 leur 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 conventionnels à base nickel dans les secteurs aéronautique et nucléaire. Toutefois, la présence d'impuretés telles que l'oxygène (O) qui se place 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 de ces alliages. La dépendance de ces propriétés avec le taux d'O est un point crucial à éclaircir pour envisager l'utilisation de ces alliages pour des applications industrielles.

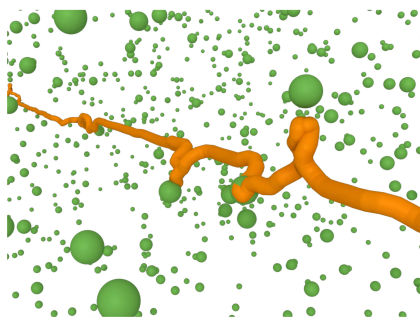


FIGURE 1 – Dislocation vis interagissant avec des atomes de carbone dans du fer.

Pour cela, nous proposons d'étudier les interactions entre dislocations (vecteurs de la déformation plastique) avec des atomes d'O interstitiels au moyen de simulations de dynamique moléculaire (voir par exemple Fig. 1). Dans un premier temps, nous étudierons le comportement d'une dislocation de caractère vis dans l'alliage modèle $Ta_{25}Nb_{25}Mo_{25}W_{25}$ en fonction de différents paramètres (vitesse de déformation et température) afin d'étudier le rôle de la matrice HEA sur la limite d'élasticité de l'alliage. Dans un deuxième temps, nous incorporerons des atomes d'O dans le système afin de tester leur influence sur le comportement de la dislocation. Ces résultats seront comparés à des simulations effectuées sur d'autres systèmes (W-O et Fe-C) ainsi qu'à des observations expérimentales afin de mieux comprendre le rôle de l'O.

Durant son séjour au laboratoire, l'étudiant-e réalisera tout d'abord une revue bibliographique du sujet. Ensuite, il-elle prendra en main le code *Lammps* permettant d'effectuer des simulations atomistiques sur des serveurs de calcul. Les résultats seront analysés grâce à des outils de visualisation et à des scripts d'analyse écrits en Python.

Nous notons que le stage ne comprenant pas de partie expérimentale, le-la stagiaire pourra effectuer une partie de son stage en télétravail si le contexte sanitaire l'oblige, et cela sans impact significatif sur le déroulement du stage. Ce projet de master sera poursuivi par une thèse de doctorat portant sur la plasticité des HEA réfractaires et financée par l'ANR à partir de septembre 2021.

Nous recherchons un-e étudiant-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 sciences des matériaux sont un plus mais ne sont pas limitantes pour la réalisation du stage.
- Un certain intérêt pour les outils informatiques et la programmation est préférable. Une connaissance de Python, Linux et Git est un plus, mais n'est pas exigée.
- Les qualités recherchées sont l'autonomie (notamment dans l'utilisation des outils numériques), une curiosité scientifique aiguisée et une certaine rigueur pour assurer une base saine à la thèse qui suit.