

Laboratoire UMET - UMR CNRS 8207

Université de Lille 1

Cité Scientifique

F59655 Villeneuve d'Ascq

FRANCE

umet.univ-lille1.fr

Modélisation atomique d'alliages à haute entropie destinés à l'optimisation de revêtements

Ce sujet de thèse s'inscrit dans le cadre d'un projet interrégional (Hauts de France et Belgique) dont l'objectif est le développement de revêtements à hautes performances à partir d'une classe émergente de matériaux, les alliages à haute entropie (AHE ou HEA en anglais). Ces alliages aux compositions complexes contiennent un assez grand nombre d'éléments métalliques en proportions égales ou voisines. La répartition spatiale aléatoire de ces éléments conduit à des structures désordonnées possédant une entropie de mélange élevée, et le désordre à l'échelle atomique confère à ces matériaux des propriétés uniques inaccessibles aux alliages conventionnels. Dans ce travail, nous nous intéresserons spécifiquement aux alliages complexes du type $Al_xCoCrCuFeNi$, dans lesquels l'aluminium joue un rôle particulier, puisque sa teneur influence fortement leur résistance à la corrosion. Ces éléments chimiques ont été présélectionnés en raison de leur aptitude à fournir de bons revêtements sous forme de couches minces.

Dans ce contexte, l'apport des modélisations et simulations atomiques, lesquelles constituent le cœur du sujet de thèse proposé, peut se révéler essentiel. En effet, vu le très grand nombre de possibilités pour produire un alliage impliquant six éléments en proportions variables, l'optimisation des paramètres microstructuraux, notamment la composition, ne peut être réalisée par des voies exclusivement expérimentales. En particulier, atteindre une bonne stabilité des revêtements implique de garantir la stabilité thermomécanique des solutions solides d'AHE, c'est-à-dire de rechercher, parmi $Al_xCoCrCuFeNi$, une tendance aussi faible que possible à la formation de composés ordonnés indésirables. Il en découle que le principal objectif de la thèse sera la construction et l'utilisation de modèles thermodynamiques permettant d'estimer, voire de prédire, les compositions à privilégier pour atteindre les critères de stabilité susmentionnés. Plus précisément, des modèles énergétiques fondés sur des développements en amas de paires seront élaborés, par ajustement sur une base de données de structures désordonnées (de type SQS pour « spécial quasirandom structures ») calculées ab initio, pour décrire des alliages de plus en plus complexes, en partant de mélanges ternaires pour atteindre $Al_xCoCrCuFeNi$. En lien avec des modèles thermostatiques mis en œuvre dans des simulations par les techniques de champ moyen ou de Monte-Carlo, ces modèles énergétiques permettront ensuite de réaliser des études de stabilité thermodynamique de la solution solide. En outre, la question de la mise en ordre locale des éléments chimiques, de grande importance pour les propriétés mécaniques, pourra être abordée, puisqu'il est connu que des arrangements particuliers d'atomes, en affaiblissant localement le « désordre moyen » de l'alliage, peuvent constituer des obstacles pour le mouvement des dislocations. Au total, ces modélisations serviront de guide en vue de l'identification des alliages les plus prometteurs pour les revêtements, et leur validité pourra être confrontée à des résultats expérimentaux obtenus dans d'autres laboratoires.

Outre ces importantes questions de stabilité thermodynamique, le sujet comportera également une partie relative à l'étude des propriétés élastiques des alliages $Al_xCoCrCuFeNi$. En utilisant les structures SQS construites pour l'élaboration des modèles énergétiques, il s'agira ici de déterminer les modules d'élasticité des alliages d'intérêt par calculs ab initio, en utilisant des techniques éprouvées (telles que l'évolution de l'énergie en fonction de la déformation). Ces données permettront d'aider à l'interprétation des résultats expérimentaux concernant le comportement mécanique des revêtements. Par ailleurs, les constantes élastiques constituent des ingrédients indispensables pour l'étude de l'influence de la contrainte mécanique sur la stabilité thermodynamique des alliages (diagramme de phases cohérent), ce qui peut conduire à des chemins de précipitation particuliers, susceptibles de modifier la propension à la formation de composés ordonnés nuisibles à la qualité des revêtements.

Le travail se déroulera au sein du groupe « Métallurgie Physique et Génie des Matériaux » (MPGM) de l'Unité Matériaux et Transformations (UMET). Ce laboratoire réalise des études aussi bien expérimentales que théoriques sur divers types de matériaux, en particulier les alliages métalliques. Le groupe MPGM a développé, depuis une vingtaine d'années, un savoir-faire en modélisations à l'échelle atomique, notamment pour ce qui concerne la thermodynamique et la cinétique d'alliages complexes. L'équipe de modélisation du groupe MPGM a développé récemment (thèse de J. Dequeker) des modèles à l'échelle atomique à partir de calculs de structure électronique (DFT), en amont des modèles Calphad/Thermocalc, pour décrire des aciers contenant quatre éléments chimiques. Ce type de modélisation pourra être étendu et appliqué aux alliages à haute entropie qui forment le sujet de la thèse proposée.

Le candidat devra avoir des aptitudes suffisantes pour la simulation numérique à l'échelle atomique, ce qui implique la capacité de réaliser les calculs avec des logiciels dédiés (Vasp). Pour ce faire, une bonne connaissance de l'environnement Unix/Linux est nécessaire, notamment pour la manipulation de fichiers et répertoires informatiques via des scripts en langage « shell ».

De plus, en vue de permettre des échanges scientifiques fructueux, une maîtrise suffisante des langues française et anglaise est également demandée.

Enfin, un goût pour la modélisation numérique et une compétence en science des matériaux et métallurgie seront utiles.

Mots - clés : alliages à haute entropie, thermodynamique, simulations atomiques, modèles d'amas

Contact :

Rémy Besson, Tél : +333 20 33 62 25 ; e-mail : remy.besson@univ-lille1.fr