

Sujet de stage Master 2 :

## Simulation du durcissement en solution solide dans les laitons dans une approche de Peirls-Nabarro

Ce sujet de stage s'inscrit dans un projet ANR visant à étudier les aspects fondamentaux du phénomène de fragilisation par un métal liquide (FML). Un matériau métallique, normalement ductile, peut subir une transition ductile/fragile quand il est mis en contact avec un métal liquide. Ce phénomène qui conduit à une rupture prématurée d'un matériau est encore largement incompris au niveau microscopique. Le point de vue adopté ici est de prendre un système dans lequel on peut observer une transition FML en fonction de la composition en zinc (dans le domaine où l'alliage est une solution solide de structure cubique face centrée) lors d'essais en contact avec un alliage métallique liquide. Dans ce système, les alliages à bas taux de zinc rompent de façon ductile en présence de métal liquide alors qu'au-delà d'une concentration critique en zinc, on peut observer un mode de rupture fragile intergranulaire. Une démarche prédictive qui se base sur une description de la transition fragile/ductile en comparant quantitativement le problème de l'émission d'une dislocation en pointe de fissure avec la rupture au sens de Griffith permettrait de progresser fortement sur le sujet. En décrivant le système particulier laiton/métal liquide qui a été isolé nous espérons pouvoir reproduire par la simulation le seuil en concentration observés expérimentalement pour la transition. La modélisation intégrera la simulation d'interfaces solide-liquides, le problème de l'émission de dislocation par une pointe de fissure, la mise en ordre dans un alliage et le durcissement en solution solide associé. Ce projet permettra la mise au point des outils prédictifs ou de mettre en lumière les insuffisances d'une approche standard pour le problème de la rupture environnementale. Un lien fort sera fait avec une démarche expérimentale in-situ qui se déroule en parallèle.

Le programme de recherche dans ce stage se focalisera sur la modélisation d'un alliage concentré de cuivre et de zinc (du laiton) à l'échelle atomique en prenant en compte l'ordre à courte distance (OCD) dans la solution solide (par modélisation Monte-Carlo). Sur des configurations simulant l'OCD expérimental, on calculera ensuite l'énergie de faute d'empilement généralisée par la méthode Nudge Elastic Band (NEB) pour modéliser la friction de réseau qui s'oppose au mouvement d'une dislocation (approche à la Peirls-Nabarro). Ce type d'approche permet de prendre en compte les effets de l'ordre à courte distance sur le durcissement en solution solide. Les méthodes utilisées seront la simulation Monte-Carlo pour la première partie et la modélisation AbInitio pour la deuxième.

La/Le stagiaire recherché(e) aura une formation, soit en physique des solides, en physique des matériaux, ou en matériau. L'étudiant(e) devra avoir suivi un cours de structure électronique et avoir une connaissance préalable des bases du calcul par la théorie de la fonctionnelle densité (DFT) notamment. La/Le candidat(e) devra avoir un goût certain pour la simulation des matériaux et le numérique. Une formation initiale ou une sensibilité en métallurgie serait un plus. Ce stage, basé à Paris, pourra se continuer par une thèse (financement prévu par le projet).

Mots clés : Simulation DFT, Monte-Carlo, alliage concentré, ordre à courte distance, durcissement en solution solide, dislocation

Contact : Thierry Auger

Laboratoire PIMM/Arts et métiers-CNRS-CNAM, UMR CNRS 8006

Tel : 01 71 93 65 21

Mel : [thierry.auger@ensam.eu](mailto:thierry.auger@ensam.eu)