

Proposition de stage de M2/thèse à l'Institut Lumière Matière, Université de Lyon

***Plasticité induite par transformation dans la zircono :
modélisation 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 zircono d'une plasticité induite par transformation martensitique (ou effet TRIP en anglais, la figure ci-dessous illustre ce type de transformation dans la zircono yttrioé.). L'objectif du stage et de la thèse, est d'étudier les mécanismes à l'échelle atomique de la transformation martensitique dans une céramique récemment identifiée, faite de zircono 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 d'un projet ANR (NANOTRIP), la thèse étant financée par ce même projet impliquant théoriciens et expérimentateurs. L'Institut Lumière Matière de l'Université de Lyon est en charge de la partie théorique. 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.

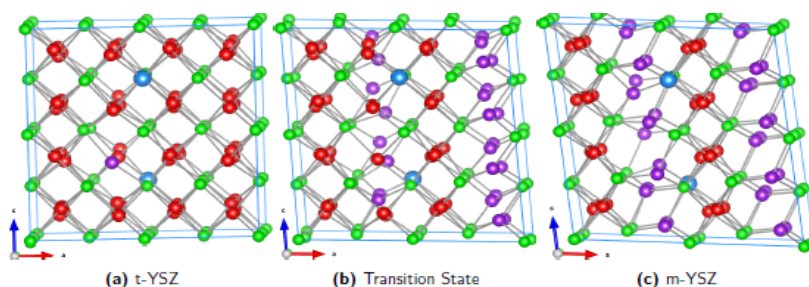


Schéma d'une transformation de phase solide-solide dans la zircono yttrioé(YSZ) .les atomes Zr, Y et O sont respectivement représentés en vert, bleu et rouge, le violet correspond à des oxygènes trivalents . À gauche la phase tétragonale(t), à droite la phase monoclinique(m), après transformation.

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

- David Rodney (david.rodney@univ-lyon1.fr)
- Tristan Albaret (tristan.albaret@univ-lyon1.fr)