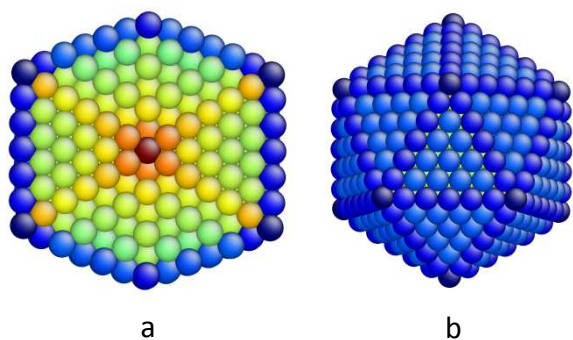


Proposition de stage de Master 2
Nouvelle approche thermodynamique appliquée aux alliages

Une des principales questions qui se pose en métallurgie est la répartition des constituants d'un alliage sur les différents sites des défauts et des interfaces (dislocations, joints de grains, surfaces), et des nanoparticules. Cette question est directement reliée au phénomène de ségrégation, défini comme l'enrichissement local en un des constituants et au diagramme de phase de volume des alliages. Différents comportements sont observés suivant que les atomes considérés sont gros ou petits, durs ou mous, ont une tendance homo ou hétéro-atomique. Chacun de ces paramètres a un effet sur la ségrégation et ces effets peuvent être en synergie ou en compétition.

Nous avons développé un nouveau formalisme qui permet de prédire les diagrammes de phases volumiques des alliages. Ce formalisme prend en compte les effets chimiques (tendance homo/hétéro-atomique) et les effets élastiques (relaxation liées à la différence des rayons atomiques des constituants). En plus de séparer ces deux effets, ce formalisme permet d'élucider les cas où ces effets entrent en compétition. Cette méthode peut s'étendre à la thermodynamique de tous les types de défauts dans les alliages ainsi qu'aux interfaces. Le travail proposé lors du stage consistera à développer cette méthode au cas des surfaces d'alliages. On considèrera les alliages, CuAg et AuPd, pour lesquels la compétition entre les effets prend des formes différentes en volume. On peut se demander si cette compétition en surface diffère de celle du volume ou pas. Cette étude est nécessaire pour comprendre la formation et la stabilité des alliages des surfaces.



Carte des énergies de ségrégation d'un Icosaèdre de 3871 atomes dans le système Cu(Ag) : (a) coupe transversale, (b) surface.

Le site de cœur en compression est défavorable (rouge foncé) à un enrichissement en atomes d'Ag (fig. a).

Les sites de sommets qui sont les sites les moins coordonnés (fig. b) sont les plus favorables (bleu foncé) à un enrichissement en atomes d'Ag.

Le dégradé de couleur varie du rouge foncé au bleu foncé i.e. du moins au plus favorable à un enrichissement en atomes d'Ag.

Ce stage s'intègre dans un vaste projet qui a pour objectif de développer une méthode intégrée partant des calculs ab initio et allant jusqu'à des simulations Monte Carlo permettant d'optimiser la répartition chimique et les contraintes élastiques, puis de déterminer les moteurs énergétiques des phénomènes étudiés par une analyse originale sur réseau effectif des résultats de ces simulations. L'obtention d'un tel outil théorique et prédictif représente un enjeu essentiel en nanosciences et plus généralement dans le milieu académique et industriel.

Ce stage pourra être poursuivi dans le cadre d'une thèse dont le sujet reste à préciser en fonction des diverses perspectives qui s'ouvriront suite à ces travaux.