

Effet super-réseau dans les revêtements multicouches : vers la détermination de propriétés mécaniques d'interface par approche éléments finis et atomistique (DFT).

Contexte : les revêtements composites multicouches sont depuis une vingtaine d'année une solution industrielle à la protection mécanique, en particulier d'outils coupant. En alternant couches fragiles et couches ductiles, la dureté ainsi que la ténacité de ces revêtements peuvent être conjointement augmentées. La période d'empilement de ces revêtements est définie comme étant l'épaisseur d'une couche fragile additionnée à celle d'une couche ductile. En diminuant cette période, pour des épaisseurs de revêtement équivalente, des propriétés mécaniques supérieures à celles des deux matériaux initiaux composant le revêtement peuvent même être observées. Cet effet est appelé effet super-réseau. Il est maintenant relativement bien connu et attribué à la multiplication des effets d'interface pour les périodes les plus faibles. Prédire ou déterminer les propriétés mécaniques de ces interfaces est particulièrement difficile. Expérimentalement, ces interfaces sont trop fines pour être caractérisées individuellement. Une approche classique par recalage de modèle éléments finis (FEM) sur une réponse expérimentale de ces revêtements obtenue par indentation a déjà été réalisée et sera complétée lors de ce stage. Elle reste néanmoins compliquée puisque concernant des couches interfaciales de seulement quelques nanomètres d'épaisseur, certes reproduites maintes fois sur un revêtement, mais où les effets de gradient de propriétés sont très présents. Nous proposons ici de coupler cette approche par éléments finis avec une approche atomistique par l'utilisation de logiciel utilisant la DFT (density functional theory).

Objectifs : l'objectif principal de ce stage sera, via un plan d'expérience de simulations atomistiques, de déterminer la structure atomique de l'interface la plus stable entre une couche TiAl et une couche TiAlN en fonction de la stœchiométrie mesurée expérimentalement par l'exploitation de spectres rayons X et des observations par microscopie électronique en transmission à haute résolution. Chaque méthode (FEM et DFT) fournira des données complémentaires donnant l'accès aux propriétés mécaniques fondamentales, telles que le module d'élasticité et la dureté, et constitueront un premier jalon vers une modélisation du comportement de ces revêtements multicouches basés sur l'accrétion des comportements mécaniques de chacun de ses constituants.

Profil : étudiant de Master 2 ou élève ingénieur en dernière année, physique/mécanique des matériaux, simulation numérique, méthodes inverses. Ce projet fait partie du projet ANR Multi-Nano-ULHC et pourra être poursuivi par un travail de doctorat.

Lieu de travail : Département Mécanique Appliquée, institut FEMTO-ST, Besançon.

Durée : 5-6 mois démarrage entre janvier et mars 2023

Rémunération : environ 800 € net/mensuel.

Encadrement : Eric Duverger¹, Fabrice Richard², Christophe Rousselot¹, Yves Gaillard²

Contact : Faire parvenir CV et LM à yves.gaillard@univ-fcomte.fr et eric.duverger@univ-fcomte.fr

1. Institut FEMTO-ST, département Micro Nano Sciences et Système (MN2S), 4 place Tharradin - BP 71427, 25211 MONTBELIARD cedex.

2. Institut FEMTO-ST, Département Mécanique Appliquée (DMA), 24 rue de l'épitaphe, 25000 Besançon