

Sujet de Thèse 2022-2025

Titre de la thèse : Nanocomposites métalliques : étude à l'échelle atomique de l'évolution microstructurale

Directeur/Co-directeur : Olivier Politano / Florence Baras

Collaborations : V. Turlo (EMPA, Thun, Switzerland), C. Cancellieri (EMPA, Dübendorf, Switzerland)

Résumé :

Un nanocomposite (NC) est un matériau solide multiphasé dont la phase de renfort est constituée de particules nanométriques. L'objectif est de tirer le meilleur parti des matériaux constitutifs afin d'obtenir un matériau à propriétés spécifiques. Par exemple, un système nanocomposite Cuivre-Tungstène (Cu/W) va présenter d'excellentes propriétés mécaniques, un faible coefficient de dilatation thermique et de fortes conductivités thermiques et électriques. Au cours de cette thèse, nous considérerons des multicouches métalliques nanométriques (N2MI) constituées d'une alternance de couches minces de deux métaux non miscibles (par exemple : Cu/Mo, Cu/Nb, Ag/Ni, Cu/W). Ces systèmes sont intrinsèquement instables en raison d'une grande densité d'interfaces.

Nous nous concentrerons sur la compréhension des mécanismes responsables du manque de stabilité des N2MI lors de traitements thermiques. En effet, ces systèmes subissent une dégradation de leur microstructure et la disparition de l'alternance régulière de couches lors d'un chauffage. Cette dégradation procède par un rétrécissement/morcellement des couches suivi d'une sphéroïdisation des fragments résiduels. L'évolution de la microstructure initiale dépend de l'épaisseur des couches, de leur microstructure (taille des grains et morphologie des joints de grains, orientations des interfaces) et des contraintes résiduelles.

Nous utiliserons la dynamique moléculaire (DM) pour simuler les N2MIs à l'échelle atomique. Dans cette approche la longueur typique des systèmes simulés (quelques nanomètres) correspond précisément à l'épaisseur des couches étudiées expérimentalement. La DM va permettre d'observer les mécanismes élémentaires sous-jacents : diffusion atomique, création de défauts, ségrégation, ... mais aussi de comprendre l'influence de l'orientation et des contraintes à l'interface, la formation de fissures et la création de barrière de diffusion. Au cours des dernières années, nous avons développé une expertise reconnue dans la simulation par DM de multicouches métalliques nanométriques constituées de métaux miscibles comme le système Ni-Al [1,2].

Nous nous focaliserons sur les systèmes non-miscibles Cu/W ou Ag/Ni qui sont très largement étudiés expérimentalement en raison de leurs applications dans de nombreux domaines. Lors d'un chauffage, la dégradation du système Cu/W procède par la formation de particules métalliques de W qui croissent aux dépens du multicouche initial pour former un nanocomposite dont la matrice est le Cu [3,4]. Nous évaluerons l'influence de la diffusion atomique le long des joints de grains et des interfaces pour déterminer les mécanismes responsables de la formation de ces particules. Nous étudierons également la stabilité relative de certaines orientations d'interfaces en complément des observations expérimentales par diffraction XRD in situ.

Les travaux seront réalisés en étroite collaboration avec des chercheurs de l'EMPA qui développent des approches calculatoires à l'échelle mésoscopique (champ de phase) et étudient la stabilité thermique des N2MI expérimentalement.

[1] F. Baras and O. Politano, Phys. Rev B 84 (2011) 024113

[2] A.S. Rogachev et al, Combustion Flame 166 (2016) 158-169

[3] K.O. Schweitz et al., The microstructural development of Ag/Ni multilayers during annealing, Phil. Mag. A80 (2000) 1867-1877.

[4] C. Cancellieri, et al., The effect of thermal treatment on the stress state and evolving microstructure of Cu/W nano-multilayers, J. of App. Phys. 120, 195107 (2016)