

Titre de la thèse/Thesis title : Effet super-réseau et endommagement dans les revêtements multicouches : vers la détermination de propriétés mécaniques par approche éléments finis et atomistique (DFT).

Laboratoire d'accueil / Host Laboratory : femto-st/DMA

Spécialité du doctorat préparé/Speciality : mécanique-matériaux

Mots-clefs / Keywords : DFT, éléments finis, nanoindentation, films minces, multicouche

Descriptif détaillé de la thèse / Job description

Contexte : Les revêtements multicouches sont depuis une vingtaine d'année une solution industrielle à la protection mécanique, en particulier d'outils coupant [1]. En alternant couches fragiles et couches ductiles, la dureté ainsi que la ténacité de ces revêtements peuvent être conjointement augmentées par effet super-réseau [2]. Les propriétés mécaniques de ces revêtements sont principalement pilotées par 2 phénomènes : la nature de l'interface formée entre couche fragile et ductile qui détermine les propriétés mécaniques globale de la couche et la nucléation de bandes de cisaillement (BC) lors d'impact qui détermine la fin de vie des revêtements. Afin de pouvoir reproduire numériquement le comportement mécanique de film multicouche la prise en compte de ces deux phénomènes est prépondérante. Dans le cadre de cette thèse nous nous proposons de les étudier et de les modéliser numériquement.

Travail de thèse : Prédire ou déterminer les propriétés mécaniques de ces interfaces est particulièrement difficile. Expérimentalement, elles sont trop fines pour être caractérisées individuellement. Une approche classique par recalage de modèle éléments finis sur une réponse expérimentale obtenue par indentation a déjà été réalisée et sera complétée lors de cette thèse. 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. Cette première étape du travail permettra d'avoir accès à une loi de comportement globale de la couche par homogénéisation des comportements des couches fragile, ductile et de transition. La seconde étape consistera à y inclure/ajouter des variables d'endommagement. En effet, une perte de rigidité locale, causée par l'endommagement du matériau, peut expliquer l'apparition de défauts tels que les bandes de cisaillement. Toutefois, si l'endommagement est bien compris lors d'essais mécaniques « simples », il demeure compliqué à appréhender lors d'essais multiaxiaux mêlant très fort gradient de déformation, pression de confinement et contact, qui plus est autour de matériaux multicouches. Si ces bandes de cisaillement sont couramment observées expérimentalement leur reproduction et plus encore la prédiction de leur apparition par simulation reste rare, voire inexistante dans la littérature. Les premiers essais réalisés sont toutefois très encourageants et montre que la reproduction numérique de tels défaut est largement envisageable.

Objectifs : Les objectifs de cette thèse sont d'établir une relation entre la perte d'intégrité d'un revêtement multicouche TiAl/TiAlN et les matériaux utilisés pour sa fabrication. Il s'agira dans un premier temps et 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. Ensuite on cherchera à construire un modèle éléments finis capable de reproduire l'apparition de bandes de cisaillement lors de l'indentation. On veillera à déterminer les charges critiques de nucléation de ces BC et à les relier, par l'intermédiaire d'une étude de sensibilité, aux paramètres matériaux utilisés dans les lois de comportement, particulièrement aux paramètres pilotant l'endommagement. On cherchera par la suite un empilement optimal afin de retarder l'apparition des BC tout en conservant une ténacité intrinsèque du revêtement raisonnable.

Environnement : Ce travail de thèse s'inscrit dans le cadre du projet ANR Multi-Nano-ULHC qui vise à optimiser les propriétés mécaniques de revêtements multicouche à partir de leurs paramètres d'élaboration. Ce projet est une collaboration entre le LMPT, l'institut FEMTO-ST et l'IPCMS.

Références bibliographiques / Bibliography

- [1] M.-J. Pac, S. Giljean, C. Rousselot, F. Richard, P. Delobelle, Microstructural and elasto-plastic material parameters identification by inverse finite elements method of $Ti(1 - x)AlxN$ ($0 < x < 1$) sputtered thin films from Berkovich nano-indentation experiments, *Thin Solid Films*. 569 (2014) 81–92. <https://doi.org/10.1016/j.tsf.2014.07.037>.
- [2] M.-J. Pac, Y. Pinot, S. Giljean, C. Rousselot, P. Delobelle, C. Ulhaq-Bouillet, M.-H. Tuilier, Investigation of $Ti\ 0.54\ Al\ 0.46 / Ti\ 0.54\ Al\ 0.46\ N$ multilayer films deposited by reactive gas pulsing process by nano-indentation and electron energy-loss spectroscopy, *Thin Solid Films*. 634 (2017) 96–106. <https://doi.org/10.1016/j.tsf.2017.05.015>.

Profil demandé / Applicant profile

Bon niveau de culture générale et scientifique. Bonnes capacités d'analyse, de synthèse et de communication.

Le candidat devra être titulaire d'un diplôme Bac+5 en mécanique ou physique des matériaux. Il devra avoir les compétences en mécanique des milieux continus et science des matériaux, et un goût prononcé pour les méthodes expérimentales et numériques. Il est souhaitable que le candidat ait de bonnes connaissances en méthodes numériques (formulation variationnelle, éléments finis, ...), en programmation (script Octave/Matlab ou Python) et maîtrise au moins un logiciel éléments finis ou DFT.

Niveau de français requis : Intermédiaire supérieur. Vous pouvez utiliser la langue de manière efficace et vous exprimer précisément.

Niveau d'anglais requis : Intermédiaire. Vous pouvez parler la langue de manière compréhensible, cohérente sur des sujets qui vous sont familiers.

Financement : UBFC (ANR-22-CE08-0008)

Dossier à envoyer avant juin. **2023**

Début du contrat : 2023 (oct.-dec.)

Direction de la thèse:/ Thesis Supervisor

RICHARD Fabrice / fabrice.richard@univ-fcomte.fr

Encadrement de la thèse : co-directeur(s) et co-encadrant(s)

DUVERGER Eric, GAILLARD Yves, ROUSSELOT Christophe

Pour postuler : Envoyer votre dossier à fabrice.richard@univ-fcomte.fr avec :

- curriculum vitae détaillé
- copie de la carte d'identité ou passeport
- lettre de motivation/projet personnel
- relevés de notes L3, M1, M2
- 2 lettres de recommandation
- noms et les coordonnées d'au moins deux personnes pouvant être contactées pour recommandation