

PROPOSITION DE POST-DOCTORAT

Référence : **PDOC-DMAS-2018-04**
(à rappeler dans toute correspondance)

Laboratoire d'accueil à l'ONERA :

Domaine : Matériaux et Structures

Lieu : ONERA-Châtillon

Département : Département Matériaux et Structures

Unité : Laboratoire d'Étude des Microstructures

Contacts : Gilles Hug – 06 46 73 45 42 – gilles.hug@onera.fr

Intitulé : Diffusion et oxydation dans les matériaux complexes, intermétalliques, phases MAX.

Mots-clés : DFT, diffusion, oxydation, TiAl, phase MAX

Contexte : L'aéronautique est fortement impactée par des enjeux de réduction des émissions polluantes (CO₂, NO_x, bruit,...) et de notre dépendance aux énergies fossiles. Pour ce faire, l'allègement des structures et à l'augmentation des températures en service sont essentielles. En phase avec les recommandations européennes, l'ONERA mène des recherches visant à réduire l'impact du transport aérien sur l'environnement. Ainsi, ce projet s'inscrit dans des actions pour apporter des réponses sur ces deux aspects simultanément, en ayant recours à des matériaux céramiques originaux de faible densité supportant des expositions à des hautes températures de service. Ces matériaux, répondant à la classe des « phases MAX », sont déposés par des procédés innovants de revêtement sur les alliages des pièces chaudes des moteurs aéronautiques.

Description du sujet : La diffusion et l'inter-diffusion des espèces atomiques dans l'état solide est un problème récurrent et omniprésent dans le domaine des matériaux métalliques tant en ce qui concerne leur élaboration que leur tenue mécanique ou à l'oxydation dans des conditions de service extrêmes de contraintes et de température. La prédiction de l'évolution des matériaux et la compréhension des mécanismes de dégradation nécessitent une bonne connaissance de la diffusion, laquelle peut être modélisée par la loi de Fick. Cela suppose, cependant, la connaissance de coefficients de diffusion et d'interdiffusion. Le but de ce projet est d'évaluer par des calculs numériques à partir des premiers principes les coefficients de diffusion dans des systèmes tels que Ti₂AlC sur substrat de TiAl ou de Ni. Pour cela des calculs de structure électronique et de phonons seront effectués. Cette approche repose sur un modèle de saut élémentaires des atomes sur un réseau cristallin. Les résultats obtenus seront réinjectés dans le logiciel Dictra de modélisation de la diffusion.

Collaborations extérieures : [Université de Limoge - Safran Tech](#)

Durée : 12 mois

Salaire net : environ 25 k€ annuel

PROFIL DU CANDIDAT

Formation : [Physique des solides, thermodynamique du solide](#)

Compétences souhaitées :

- DFT
- Fortran, Unix
- Capacité de publication attestée.