

**PROPOSITION DE SUJET DE THESE****Intitulé : Modélisation atomistique d'alliages magnétiques métalliques**Référence : **MAS-DMAS-2023-08**  
(à rappeler dans toute correspondance)**Début de la thèse** : 01/10/2024**Date limite de candidature** : 05/07/2024**Mots clés**

alliage métallique, magnétisme, simulations à l'échelle atomique, thermodynamique, cinétique

**Profil et compétences recherchées**

Profil : Physique du solide et physique des matériaux

Compétences : Bonne connaissance de la physique de la matière condensée (thermodynamique, interaction électron-matière, mécanique quantique, magnétisme ...) ainsi qu'un goût prononcé pour mener des simulations numériques.

**Présentation du projet doctoral, contexte et objectif**

La modélisation en science des matériaux se doit de rendre compte des diverses échelles mises en jeu, spatiales (du nm au  $\mu\text{m}$ ) ou de temps (de la picoseconde à l'heure ... voire plus), qui interviennent simultanément par exemple du point de vue des diverses longueurs caractéristiques d'un phénomène d'auto-organisation, ou des divers temps caractéristiques de processus cinétiques de croissance et/ou de diffusion. Dans ce contexte, une méthodologie partagée par une grande partie de la communauté scientifique consiste à partir d'une définition à l'échelle atomique des interactions basée sur une description de la structure électronique de précision pertinente et éventuellement ajustable. Cette description va ainsi des méthodes dites ab initio jusqu'aux approches plus légères mais paramétrées, du type liaisons fortes qui permettent de moduler le niveau de description nécessaire au bon traitement du problème abordé

Un bel exemple de cette complexité concerne les alliages métalliques à base de fer dont les diverses propriétés sous sa forme massive (structurales, thermodynamiques, cinétiques, ...) sont principalement pilotées par le magnétisme. En pratique, une modélisation précise des alliages magnétiques nécessite une description correcte des effets thermiques, tels que les vibrations du réseau, l'expansion thermique ainsi que les excitations et transitions magnétiques. Tous ces multiples effets sont corrélés les uns aux autres avec un impact important sur la stabilité des phases chimiques mais également sur de nombreux processus cinétiques. Un traitement approprié des différents degrés de liberté impliqués et de leur couplage est à l'heure actuelle un défi majeur pour la modélisation et les simulations à l'échelle atomique, en particulier pour leur dépendance à la température et à la composition de l'alliage.

Dans cette thèse, nous chercherons à développer et à mettre en place une approche de modélisation de type multi-échelle pour prédire les propriétés thermodynamiques et cinétiques des alliages métalliques magnétiques en fonction de la température. Nous nous concentrerons sur les alliages à base de fer en tant que système de référence. Les propriétés visées comprennent les limites de phase chimiques et magnétiques, les concentrations de défauts ponctuels, les coefficients de diffusion atomique et la cinétique de précipitation.

Pour mener à bien cet objectif, nous chercherons à combiner des modèles d'interaction effective sur réseau (EIM pour Effective Interaction Model) et des simulations de type liaisons fortes (TB pour Tight-Binding), tous deux présentant des paramètres à ajuster sur les données abinitio reposant sur la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT). Des simulations Monte Carlo (MC)

hors réseau utilisant le modèle TB seront effectuées pour une étude détaillée des propriétés thermodynamiques, où la vibration du réseau et l'expansion thermique sont naturellement prises en compte. D'autre part, des simulations Monte Carlo cinétiques sur réseau utilisant le modèle EIM seront particulièrement efficaces pour l'étude de la diffusion atomique et des processus cinétiques induits par la diffusion. A noter que nos précédentes simulations cinétiques de ce type n'incluent explicitement que les effets magnéto-chimiques. Dans cette thèse, nous proposons d'utiliser les résultats de TB pour implémenter les effets d'excitation du réseau dépendant de la température dans l'approche EIM pour une description magnon-phonon-chimique complète. Enfin, nous explorerons également la faisabilité de nouvelles simulation Monte Carlo sur et hors réseau impliquant à la fois les modèles EIM et TB.

Pour conclure, il est important de préciser que les résultats de la thèse seront prometteurs dans le domaine très général des sciences des matériaux puisque les alliages magnétiques considérés servent de base à des aciers aux multiples applications technologiques et ils constituent également un réel challenge à modéliser au niveau fondamental.

#### **Collaborations envisagées**

Ce travail sera réalisé dans le cadre du LRC-MAXIT via une collaboration entre le S2CM/SRMP (CEA-Saclay) qui possède avec une forte expertise dans le développement et l'application des modèles EIM pour les alliages à base de Fe et le LEM qui a une grande expérience sur les modèles liaisons fortes pour les systèmes métalliques.

#### **Laboratoire d'accueil à l'ONERA**

Département : DMAS/LEM

Lieu (centre ONERA) : CC

**Contact** : AMARA Hakim

Tél. : 01 46 73 48 90 Email : hakim.amara@onera.fr

#### **Directeur de thèse**

Nom : Hakim AMARA

Laboratoire : LEM (ONERA-CNRS)

Tél. : 01 46 73 48 90

Email : hakim.amara@onera.fr

Pour plus d'informations : <https://www.onera.fr/rejoindre-onera/la-formation-par-la-recherche>