

PROPOSITION DE THESE 2021-2024

Sujet : Étude expérimentale et théorique de la diffusion de l'oxygène dans des alliages de titane

Thématique : physique, chimie, matériaux

Mots clés : diffusion, alliages, modélisation

Description :

Les alliages à base de titane sont utilisés comme matériaux de structure dans des applications aéronautiques en raison de leurs excellentes propriétés mécaniques spécifiques. Cependant, à haute température, ils sont limités par leurs tenue en fluage et par leur résistance à l'environnement. En effet, le titane présente une solubilité en oxygène particulièrement élevée. La dissolution de l'oxygène sous la couche d'oxyde de surface et sa diffusion dans l'alliage entraînent une fragilisation qui peut faciliter l'amorçage et la propagation de fissures de fatigue. Il est donc essentiel de pouvoir prédire la cinétique de croissance de la zone enrichie en oxygène.

Le but de cette thèse est de modéliser la dissolution et la diffusion de l'oxygène dans les alliages de titane. Ce travail s'appuiera sur une approche combinant expériences et modélisation multi-échelle. D'un point de vue expérimental, des alliages modèles binaires et ternaires seront utilisés pour mesurer l'effet de certains éléments d'alliage sur l'enrichissement en oxygène, qui sera mesuré par un ensemble de techniques complémentaires (profils de micro-dureté, profils de concentrations par microsonde de Castaing, par SIMS --avec utilisation d'oxygène $^{16}\text{O}_2$ et $^{18}\text{O}_2$ --), voire par microscopie électronique en transmission et par sonde atomique tomographique). Le travail de modélisation reposera sur des simulations à l'échelle atomique (calculs *ab initio*) ainsi que des simulations de diffusion à une échelle micrométrique utilisant des codes en différences finies disponibles au laboratoire. Les simulations à l'échelle atomique, déjà utilisées au CIRIMAT sur ce type de calculs, permettront d'évaluer la limite de solubilité et le coefficient de diffusion de l'oxygène dans les alliages d'intérêt. Les simulations à l'échelle micrométrique permettront d'analyser les résultats expérimentaux et de réaliser des prévisions de comportement. La force de la modélisation est de pouvoir réaliser des expériences numériques sur des compositions chimiques variées et ainsi tester différentes combinaisons. L'ensemble de ce travail devra permettre de progresser dans la compréhension de l'enrichissement en oxygène et d'acquérir des données permettant d'aider au développement de nouveaux alliages plus résistants à l'oxydation-fragilisation.

CONTEXTE :

Ce projet s'insère dans une étude portée par l'ONERA, financée par la DGAC (Direction générale de l'aviation civile), et conduite en lien avec plusieurs industriels de l'aéronautique (Safran, Airbus, Liebherr Aerospace).

LOCALISATION :

Le travail de thèse sera réalisé principalement au CIRIMAT (Centre Inter-universitaire de Recherche et d'Ingénierie des Matériaux, UMR 5085) INP-ENSIACET, 4 allée Emile Monso BP44362 31030 Toulouse cedex 4 France, en collaboration étroite avec l'ONERA (Châtillon). L'école doctorale sera « Science de la matière (SDM), Université de Toulouse ».

Date souhaitée pour le début de la thèse : 01/10/2021

PERSONNES A CONTACTER PAR LE CANDIDAT

Damien Connetable (damien.connetable@ensiacet.fr) (co-directeur de thèse)

Thomas Gheno (thomas.gheno@onera.fr) (porteur du projet, co-encadrant de thèse)

Daniel Monceau (daniel.monceau@toulouse-inp.fr) (co-directeur de thèse)