

Stage M2 / IRT – projet FRONTALAS

Fonctionnalisation et Traitements de surface par Laser : Une étude par dynamique moléculaire

Département PMDM@ICB / MaNaPI et M4OxE

Encadrants : Florence Baras (florence.baras@u-bourgogne.fr) et
Olivier Politano (olivier.politano@u-bourgogne.fr)

Contexte : Fort des avancées technologiques dans les domaines des traitements de surfaces, les technologies laser sont d'ores et déjà reconnues pour leur grande qualité de précision et d'automatisation adaptable tant aux morphologies de surfaces qu'aux états de surfaces (traitement sélectif). Néanmoins peu d'analyses phénoménologiques permettent aujourd'hui d'expliquer les transformations de surface induites de façon précise. En effet, compte tenu du caractère très localisé des modifications générées (premières couches atomiques) dues aux temps très brefs de traitement (pour des régimes sub-picosecondes), l'état structural et mécanique final de la surface traitée reste quasiment inconnu. La connaissance et la maîtrise de cet état est pourtant crucial pour appliquer ce type de traitement à des cas industriels. Dans le cas des techniques de préparation de surface, le laser est considéré comme un procédé dit « propre » ne nécessitant aucun complément chimique (solvant) ou mécanique (projectiles de différentes natures).

Dans le projet IRT FRONTALAS, nous couplons plusieurs techniques, expérimentales et numériques, pour analyser finement l'état structural et mécanique des couches superficielles : diffraction des rayons X en incidence rasante, EBSD, microscopie micro-onde à balayage et simulations par dynamique moléculaire.

Projet de recherche : Comme les profondeurs affectées par le traitement laser sont de l'ordre de quelques dizaines de nm, l'approche par dynamique moléculaire est d'autant plus appropriée qu'elle permet de décrire les mécanismes élémentaires associés : fusion du matériau, déplacement des zones fondues et formation de bourrelets à la surface, éjection de nano-gouttes par vaporisation, recristallisation après refroidissement, formation de défauts dans le solide cristallin au voisinage de l'impact, ... Les interactions seront décrites par un potentiel adapté au système envisagé, ici le nickel Ni (Embedded Atom Method). L'impact laser à la surface sera modélisé par une loi d'absorption du type Beer-Lambert avec différents paramètres ajustables (intensité du spot, durée du pulse, largeur du spot). Nous suivrons la dynamique de création de l'impact et nous évaluerons les perturbations thermiques et mécaniques en analysant le profil de température et les champs de contraintes. Après la relaxation, nous pourrions décrire avec précision la nano-structuration : défauts dans le cristal, profil de la zone amorphe, gradient de distance inter-réticulaire selon l'épaisseur traitée, caractérisation des défauts, ... Ces mesures pourront être comparées directement aux données expérimentales obtenues par DRX et aux mesures de contraintes par micro-ondes.

Type de projet : théorie et modélisation, simulations de dynamique moléculaire

Compétences requises : Des connaissances de base en science des matériaux et en physique statistique sont souhaitées. Un attrait pour les méthodes numériques est indispensable et une connaissance de base de programmation (Matlab) est nécessaire. Le(la) candidat(e) apprendra les outils nécessaires pour développer des simulations moléculaires avec le logiciel open-source LAMMPS. La curiosité scientifique du (de la) candidat(e) sera appréciée.