

# Sujet attribué : Romane GUERRA

## Sujet d'Alternance 1A

*Calcul quantique, modélisation vibratoire et caractérisation mécanique des alliages à mémoire de forme*

## Laboratoire et Encadrant

**Laboratoire :** Laboratoire de Mécanique et d'Acoustique (LMA) - UMR 7031 AMU - CNRS - Centrale Marseille

**Localisation :** 4 impasse Nikola Tesla, CS 40006, 13453 Marseille Cedex 13, France

**Encadrant :**

**Nom :** Erick OGAM

**Titre :** Ingénieur de Recherche, Docteur en Acoustique

**E-mail :** [ogam@lma.cnrs-mrs.fr](mailto:ogam@lma.cnrs-mrs.fr)

**Téléphone :** 06 12 85 50 76

## Sujet

**Titre :** *Calcul quantique, modélisation vibratoire et caractérisation mécanique des alliages à mémoire de forme (AMF)*

Ce projet a pour but d'étudier les alliages à mémoire de forme (AMF) en combinant des méthodes de calcul quantique, des simulations vibratoires avec *Abaqus* et des techniques expérimentales telles que les mesures ultrasoniques et vibratoires. L'objectif est de déterminer les propriétés mécaniques des phases des AMF et de valider les résultats théoriques par des expériences.

## Résumé

Ce projet se concentre sur l'étude des alliages à mémoire de forme (AMF) en s'appuyant sur :

### 1) Détermination des phases présentes :

- Réalisation d'analyses *EDS* (Energy Dispersive X-ray Spectroscopy) pour obtenir la composition chimique précise des alliages.
- Utilisation de *DRX* (Diffraction des Rayons X) pour analyser la structure cristalline des alliages.
- Exploitation des diagrammes de phase générés par *ThermoCalc*, combinée aux résultats des analyses *EDS* et *DRX*, pour identifier les phases présentes en fonction de la composition, de la température et des conditions thermiques.

- 2) **Calculs quantiques** : Modélisation et optimisation des structures atomiques des phases identifiées avec *Burai*, suivies de calculs des propriétés mécaniques (constantes élastiques, module de Young) via *Quantum Espresso*.
- 3) **Modélisation vibratoire** : Réalisation de simulations numériques dans *Abaqus* pour étudier les réponses vibratoires des alliages sous différentes configurations mécaniques.
- 4) **Caractérisation mécanique** : Réalisation de mesures ultrasoniques et vibratoires pour déterminer la vitesse de propagation des ondes et extraire les propriétés élastiques des échantillons.
- 5) **Validation expérimentale** : Comparaison des données expérimentales avec les résultats numériques pour caractériser et valider les propriétés mécaniques des AMF.

## Détail des étapes

### 1) Étude des diagrammes de phases :

- Analyse des diagrammes générés par *ThermoCalc* pour identifier les phases présentes selon la composition chimique et les conditions thermiques.

### 2) Calculs quantiques :

- Optimisation des structures atomiques avec *Burai*.
- Calcul des propriétés élastiques (constantes élastiques, module de Young) via *Quantum Espresso*.

### 3) Modélisation vibratoire avec *Abaqus* :

- Création de modèles numériques des AMF en forme de disque dans *Abaqus*.
- Définition des propriétés matérielles basées sur les résultats des calculs quantiques et expérimentaux.
- Simulation des réponses vibratoires et calcul des fréquences de résonance.

### 4) Mesures ultrasoniques et vibratoires :

- Réalisation d'expériences dans un dispositif à base d'eau pour mesurer la vitesse des ondes ultrasoniques.
- Mesures vibratoires pour obtenir les fréquences de résonance des échantillons.

### 5) Validation et analyse des résultats :

- Comparaison des résultats expérimentaux et numériques.
- Validation des propriétés mécaniques et analyse des écarts entre les modèles et les expériences.

## Résultats Attendus

- Détermination précise des propriétés mécaniques (module de Young, constantes élastiques) des phases des AMF.
- Automatisation des processus de calcul et d'analyse.
- Validation expérimentale des propriétés mécaniques des AMF.
- Développement d'un modèle numérique dans *Abaqus* simulant avec précision les réponses vibratoires.
- Développement d'un rapport synthétique avec une interprétation des résultats.

## Compétences Développées

- **Calcul quantique** : Maîtrise des outils comme *ThermoCalc*, *Burai* et *Quantum Espresso* pour la modélisation et le calcul des propriétés mécaniques des alliages.
- **Modélisation vibratoire** : Utilisation avancée de *Abaqus* pour simuler et analyser les réponses vibratoires des alliages.
- **Caractérisation expérimentale** : Réalisation et interprétation des mesures ultrasoniques et vibratoires pour extraire les propriétés élastiques des échantillons.
- **Étude bibliographique** : Recherche et synthèse d'articles scientifiques pour comprendre les principes fondamentaux des alliages à mémoire de forme et des techniques associées.
- **Écriture d'un rapport scientifique** : Rédaction d'un document technique détaillé et structuré, intégrant les résultats obtenus, leur analyse et leur interprétation.
- **Communication scientifique** : Présentation des résultats à l'oral, en adaptant le discours à différents publics (technique ou général), et capacité à répondre aux questions.
- **Programmation** : Développement de scripts pour automatiser les calculs et les traitements de données expérimentales.
- **Analyse scientifique** : Capacité à interpréter les données expérimentales et numériques pour valider les modèles théoriques.

---

Validation pour mise en ligne ECM :

