

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

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 :

