

Offre de thèse

Sujet: Interface modèles pour le design d'aimants permanents Nd-Fe-B

Informations générales

Lieu de travail : Nancy

Type de contrat : CDD contrat doctoral

Durée du contrat : 3 ans.

Date d'embauche prévue : 1^{er} Octobre 2024

Quotité de travail: Temps plein

Rémunération : 2135 €/mois (brut).

Niveau d'études souhaité : Master en Physique, Chimie du Solide, Science des Matériaux

Expérience souhaitée : Master

Description du projet:

1. Introduction.

Les aimants permanents à base de terres rares (TR) comme le Nd-Fe-B sont des matériaux essentiels pour l'avenir énergétique de l'Europe, entrant dans la construction de moteurs pour les véhicules électriques et les éoliennes par exemple. Ces matériaux possèdent des propriétés magnétiques exceptionnelles, basées sur la phase $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$. Cependant, les propriétés intrinsèques de la phase tétragonale $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ sont massivement sous-exploitées et de nombreux efforts sont nécessaires pour traduire ces propriétés magnétiques intrinsèques en de meilleures propriétés extrinsèques [1-4]. La raison tient en ce que les aimants Nd-Fe-B sont des matériaux complexes et multiphasés, dont les propriétés ne dépendent pas seulement des propriétés intrinsèques de la phase $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ mais aussi de la microstructure du matériau dans son ensemble et notamment de la nature des phases intergranulaires formées lors de la mise en forme du matériau. La phase $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ elle-même présente une forte aimantation à saturation, une anisotropie monocristalline élevée à l'origine d'une rémanence (Br) importante et une coercivité intrinsèque élevée (Hci), la rendant résistante à

la désaimantation. Les performances globales de l'aimant sont décrites par le produit énergétique maximal ((BH)max), qui dépend à la fois de Br et de Hci (voir une comparaison de différents matériaux sur la figure 1).

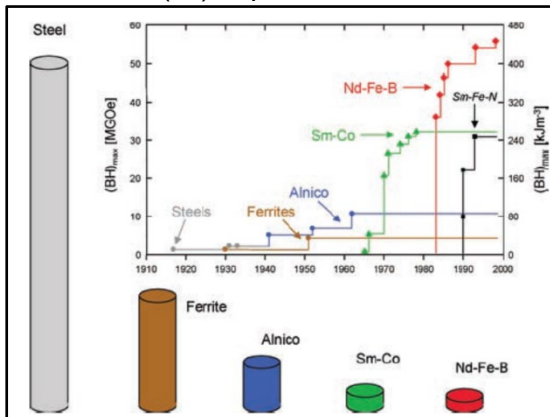


Figure 1: Evolution des ((BH)max) à température ambiante pour différents matériaux magnétiques durs en fonction des années. Adapté de [1].

Cependant, dans les aimants frittés classiquement, les grains de $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ sont microscopiques et des phases intergranulaires sont formées aux joints de grain. Lorsque le matériau est exposé à une force démagnétisante, la désaimantation commence dans les régions situées aux interfaces qui peuvent présenter une plus faible coercivité avant de se propager rapidement (modèle de nucléation), la coercivité étant influencée par les propriétés chimiques, structurales et magnétiques des phases intergranulaires. Malgré tous les efforts réalisés jusqu'à maintenant, les coercivités observées dans les aimants permanents Nd-Fe-B ne représentent que 20 % de ce qui est théoriquement possible d'obtenir (c'est-à-dire le H_a), ce qui signifie que des améliorations significatives sont possibles. Dans cette optique, une idée est de développer des aimants permanents Nd-Fe-B constitués de grains de la phase $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ éliminés de ces phases et impuretés parasites et de recréer de nouvelles interfaces contrôlées *in situ* en utilisant de nouveaux procédés d'élaboration. Le projet global dans lequel s'inscrit ce projet de thèse consistera à créer de nouveaux matériaux d'interface en se basant sur des simulations thermodynamiques et micromagnétiques. Un aspect important sera de tester ces idées en créant des interfaces modèles en utilisant des monocristaux $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ comme substrats sur lesquelles des films minces de la phase intergranulaire précédemment optimisée seront élaborés pour être caractérisées exhaustivement. Cette approche sera étendue aux grains isolés provenant de poudres recyclées ou fraîchement produites afin de développer de nouveaux aimants permanents Nd-Fe-B optimisés grâce à cette ingénierie des joints de grain.

2. Objectifs.

Le programme de doctorat se concentrera sur les aspects les plus fondamentaux du projet global décrit ci-dessus, en créant des interfaces modèles à partir desquelles les mécanismes physiques de base en jeu pourront probablement être mieux compris. Une phase intergranulaire optimisée sera proposée sur la base de calculs micromagnétiques et des prédictions des propriétés intrinsèques (aimantation à saturation - M_s , température de Curie - T_C , constante d'anisotropie - K_1 et/ou champ d'anisotropie - H_a) pour obtenir l'anisotropie magnétocristalline la plus élevée possible et une T_C élevé avec les éléments d'alliage. Pour réaliser une interface modèle, des films minces de la phase intergranulaire seront élaborés sur des substrats monocristallins de la phase $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$. Pour cela, des monocristaux de haute qualité structurale et de dimensions de quelques mm^3 devront être élaborés soit par une méthode de flux soit par la méthode Czochralski, Les cristaux devront être extraits et alignés par diffraction Laue. Les surfaces de monocristaux de bas indice (001) et (100) seront examinées dans les conditions de l'ultravide à l'échelle atomique. Cela constitue un défi car, malgré l'importance technologique de la phase tétragonale $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$, la littérature sur la science de surface de ce matériau est très limitée. La première étape consistera à optimiser les conditions de préparation de la surface afin d'obtenir une morphologie de surface en terrasses et marches. Les surfaces seront caractérisées par des méthodes telles que la diffraction d'électrons lents (LEED), la microscopie à effet tunnel (STM) et la spectroscopie de photoémission de rayons X (XPS). Ensuite, une interface modèle sera créée en faisant croître un film ultra-mince du matériau d'interface spécifique sur le substrat nu $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$. Le mode de croissance initial du film ainsi que sa structure et sa chimie seront déterminés en surface pour diverses conditions de croissance. Une analyse des interface (coupe transverse) apportera des informations cruciales sur la répartition chimique et les éventuelles phases formées en fonction des paramètres de croissance et des post-traitements. Les propriétés magnétiques résultantes seront étudiées à différentes échelles de longueur en utilisant différentes techniques, en collaboration avec d'autres institutions partenaires. La compréhension détaillée d'un tel système modèle sera crucial pour mettre en œuvre la stratégie globale du projet.

3. Méthodes.

Les méthodes à utiliser impliquent la synthèse de monocristaux de grandes dimensions de la phase pure $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ nécessaires aux expériences de science des surfaces sous ultravide (UHV). Les surfaces nues seront préparées par des cycles de bombardement (Ar^+) suivis de recuits à des températures optimisées afin d'obtenir des terrasses atomiquement plates séparées par des marches. La propreté de la surface et la composition chimique proche de la surface (les premiers nanomètres) seront déterminées in situ par XPS. Les structures atomiques de surface seront étudiées par LEED et par STM. De telles surfaces serviront de plates-formes pour construire des interfaces modèles. Des films minces reproduisant la phase intergranulaire seront déposés dans les conditions de l'UHV par des méthodes de dépôt physique en phase vapeur. Différents paramètres de croissance seront évalués, notamment le flux, la température du substrat durant le dépôt, les post-traitements, etc. Des coupes transversales seront préparées par FIB et les lames minces résultantes seront étudiées par microscopie électronique en transmission. Les propriétés physiques des interfaces modèles seront analysées expérimentalement, tant en interne que dans les institutions partenaires.

References:

- [1] H. Sepehri-Amin, S. Hirosawa, K.Hono, "Advances in Nd-Fe-B Based Permanent Magnets", Ed. E. Brück, in Handbook of Magnetic Materials, Elsevier, Volume 27, 2018, Pages 269-372.
- [2] Coey, J., "Perspective and prospects for rare earth permanent magnets". Engineering, 2020. 6(2): p. 119-131.
- [3] K.Hono, H. Sepehri-Amin, "Prospect for HRE-free high coercivity Nd-Fe-B permanent magnets", Scripta Materialia 151 (2018) 6–13.
- [4] Tang et al., "Unveiling the origin of the large coercivity in (Nd,Dy)-Fe-B sintered magnets", NPG Asia Materials (2023) 15:50.

Compétences

Master en physique, science des matériaux ou chimie du solide. Une première expérience en caractérisation de matériaux serait appréciée. Maîtrise de l'anglais (écrit et oral).

A propos de l'Institut Jean Lamour

L'Institut Jean Lamour (IJL, <https://ijl.univ-lorraine.fr>) est une unité mixte de recherche du CNRS et de l'Université de Lorraine. Il est rattaché à l'Institut de Chimie du CNRS. Spécialisé en science et ingénierie des matériaux et des procédés, il couvre les champs suivants : matériaux, métallurgie, plasmas, surfaces, nanomatériaux, électronique.

L'IJL compte 263 permanents (30 chercheurs, 134 enseignants-chercheurs, 99 IT-BIATSS) et 394 non-permanents (182 doctorants, 62 post-doctorants / chercheurs contractuels et plus de 150 stagiaires), de 45 nationalités différentes. Il collabore avec plus de 150 partenaires industriels et ses collaborations académiques se déploient dans une trentaine de pays. Son parc instrumental exceptionnel est réparti sur 4 sites dont le principal est situé sur le campus ARTEM à Nancy.

Contraintes et risques

Pas de risque particulier.

Le/la candidat(e) sélectionné(e) devra être préalablement approuvé(e) par l'autorité compétente du ministère de l'Enseignement supérieur, de la Recherche et de l'Innovation conformément à la réglementation en vigueur dans un secteur relatif à la protection du potentiel scientifique et technique.

Modalités de candidature

Les candidat(e)s intéressé(e)s doivent postuler via le site du CNRS en joignant un CV, une lettre de motivation et les noms de deux ou plusieurs référents :

<https://emploi.cnrs.fr/Offres/Doctorant/UMR7198-MARTAI-112/Default.aspx>

Les candidats présélectionnés seront contactés pour un entretien.

Informations complémentaires :

- Vincent Fournée (Directeur de Recherche CNRS) : vincent.fournee@univ-lorraine.fr
- Julian Ledieu (Directeur de Recherche CNRS) : julian.ledieu@univ-lorraine.fr