

Offre de thèse pour un CDD doctorant

Début : à partir d'octobre 2026

Mise en ordre cristallin dans les alliages Ti₂AlNb : vers un alliage orthorhombique de nouvelle génération

Informations générales

Lieu de travail : Institut Jean Lamour, Nancy

Type de contrat : Contrat doctoral

Durée du contrat : 36 mois

Date d'embauche prévue : Octobre 2026

Quotité de travail : Temps complet

Rémunération : 2300€ brut mensuel

Niveau d'études souhaité : Master en Sciences des Matériaux/Ecole d'Ingénieurs

Problématique

Malgré leurs propriétés améliorées par rapport aux alliages de titane conventionnels, les alliages Ti₂AlNb (également appelés alliages orthorhombiques en raison de la forte fraction de phase O de structure orthorhombique à la température ambiante) n'ont pas encore trouvé une utilisation industrielle répandue. En effet, la ductilité à température ambiante varie considérablement en fonction de légères modifications de la composition de l'alliage et/ou des conditions de traitement thermique. Ce problème constitue un verrou scientifique à résoudre, notamment pour les applications industrielles visant à utiliser les alliages Ti₂AlNb à la place des superalliages de nickel bien plus lourds.

Comparés à d'autres alliages industriels, comme les aciers, les superalliages à base de nickel ou les alliages à base d'aluminium, les alliages Ti₂AlNb présentent une particularité : leur matrice β à haute température peut avoir de différents degrés d'ordre à longue distance (ordre correspondant à la structure B2). Le comportement mécanique des phases ordonnées diffère fortement de celui des phases complètement désordonnées. Ainsi, les alliages orthorhombiques sont uniques, car il est essentiel de contrôler l'ordre de la phase β , notamment pendant les traitements thermiques à haute température, afin d'obtenir des propriétés adéquates. Malgré l'importance fondamentale et pratique évidente de ce phénomène, l'effet de l'ordre de la phase β sur les transformations de phases et les propriétés mécaniques dans les alliages orthorhombiques n'a pas été étudié.

Objectifs et programme de la thèse

L'objectif de ce projet doctoral est d'étudier l'effet de la composition chimique sur l'ordre de la matrice β à haute température et sur la formation ultérieure de la microstructure dans les alliages orthorhombiques. Les propriétés mécaniques associées seront évaluées par des essais de traction afin de proposer des critères de composition, basés sur la ductilité, en vue d'une optimisation future de la composition des alliages orthorhombiques. La thèse comprendra un volet numérique et un volet expérimental et se déroulera en deux étapes :

1) Screening de composition et simulations DFT

Dans un premier temps, des échantillons à gradient de la teneur en Al/Nb seront élaborés en utilisant une des techniques de la fabrication additive, la DED (direct energy deposition), pour un screening accéléré de l'espace de composition avec l'objectif d'identifier les teneurs en Al et en Nb permettant de produire la phase β avec deux états d'ordre extrêmes : entièrement ordonné et entièrement désordonné, ainsi qu'avec un ordre partiel. Bien que la fraction de phase β dans les alliages Ti₂AlNb puisse être prédite de manière fiable à l'aide de l'approche CALPHAD et de bases de données commerciales, la prédiction précise du degré d'ordre de la phase β reste un défi majeur. Pour répondre à cette problématique, nous utiliserons l'échantillon à gradient de composition afin d'explorer différents niveaux d'ordre dans la phase β . Afin de compléter les analyses expérimentales (le degré d'ordre dans l'échantillon à gradient sera analysé par la diffraction des rayons X (DRX)), une approche numérique sera également mise en œuvre : plusieurs supercellules B2 partiellement ordonnées seront générées pour les compositions étudiées à l'aide du logiciel ATAT. Pour chaque composition, la structure la plus stable à $T = 0$ K sera déterminée en utilisant la théorie de la fonctionnelle de densité (DFT), puis le degré d'ordre obtenu sera comparé aux données expérimentales.

Ensuite, une étude plus approfondie sera menée grâce à la méthode récente Multi-Cell Monte Carlo (MC²), spécialement conçue pour prédire les phases stables dans des alliages chimiquement complexes. Cette méthode sera combinée aux potentiels interatomiques existants pour les systèmes Ti-Al-Nb. Contrairement aux calculs à 0 K, cette approche permet de prendre en compte les effets de la température, tout en explorant un espace de composition plus large. L'objectif est de développer une méthode fiable de prédiction du degré d'ordre de la phase β en fonction des variations du rapport Al/Nb. Cette étape permettra de relier les résultats des simulations atomistiques aux observations expérimentales.

2) Mise en ordre et mécanismes de transformations de phases

La décomposition de la phase β lors de traitements isothermes et de refroidissements continus sera ensuite étudiée afin d'analyser l'effet de la composition chimique et de l'ordre cristallin sur la séquence des transformations de phase menant à la microstructure finale. Dans ce cadre, trois alliages chacun présentant un degré d'ordre différent dans la phase β à haute température (faible (0,2 – 0,3), intermédiaire (proche de 0,5) et élevé (proche de 1)) seront fabriqués en utilisant les résultats du screening précédent et des calculs DFT.

Les transformations de phase seront suivies par des mesures de résistivité électrique en conditions isothermes, puis complétées par une caractérisation post mortem de la microstructure, principalement par microscopie électronique à balayage (MEB) et microscopie électronique en transmission (MET). À partir de ces données, des diagrammes Temps-Température-Transformation (TTT) seront établis, permettant de tirer des premières conclusions sur l'effet du degré d'ordre sur les transformations de phase dans les alliages orthorhombiques.

En utilisant ces diagrammes TTT, les conditions optimales pour les traitements thermiques non isothermes seront définies. Pour ces conditions, des expériences in situ seront réalisées au synchrotron (à l'ESRF et/ou au DESY). L'utilisation du rayonnement synchrotron est indispensable, car les auteurs ont récemment démontré qu'une décomposition sans diffusion de la phase β peut se produire lors du refroidissement, et que la cinétique de décomposition de la phase β peut être très rapide.

Enfin, en exploitant les résultats sur la cinétique et la caractérisation microstructurale, plusieurs états microstructuraux représentatifs seront sélectionnés pour une caractérisation mécanique, réalisée par essais de traction à température ambiante.

En résumé, ce projet vise à lever un verrou scientifique majeur lié au comportement des alliages Ti₂AlNb en établissant, pour la première fois, un lien clair entre le degré d'ordre de la phase β et les

propriétés des alliages orthorhombiques. Il apportera des connaissances fondamentales nouvelles sur l'ordre cristallin dans un alliage ternaire concentré et sur son rôle dans les transformations de phases, tout en ouvrant la voie à une ingénierie rationnelle des alliages Ti-Al-Nb. Ces résultats auront un fort potentiel de diffusion dans la communauté scientifique et pourraient servir de base à la création d'alliages plus légers pour des applications industrielles à haute valeur ajoutée.

Contexte de travail

La thèse se déroulera à l'Institut Jean Lamour à Nancy, sous la direction de Vladimir Esin et Maeva Cottura.

A l'issue de la thèse l'étudiant ou l'étudiante aura appris à maîtriser la panoplie des dernières techniques de pointe dans le domaine de la caractérisation des matériaux métalliques (DRX, MEB, MET, mesure de résistivité électrique, essais de traction) ainsi que les méthodes de simulations de la DFT et Calphad : un bagage précieux pour sa future carrière dans la recherche industrielle ou académique.

Compétences

- Titulaire d'un diplôme d'ingénieur ou d'un Master 2 dans le domaine de la science des matériaux.
- Connaissances en métallurgie et caractérisation des matériaux métalliques.
- Intérêt pour la modélisation numérique et les méthodes de simulation.
- Anglais courant.

A propos de l'Institut Jean Lamour

L'Institut Jean Lamour (IJL) est une unité mixte de recherche du CNRS et de l'Université de Lorraine. Spécialisé en science et ingénierie des matériaux et des procédés, il couvre les champs suivants : matériaux, métallurgie, plasmas, surfaces, nanomatériaux, électronique.

En 2026, l'IJL compte 258 permanents (33 chercheurs, 133 enseignants-chercheurs, 92 IT-BIATSS) et 389 non-permanents (146 doctorants, 43 post-doctorants / chercheurs contractuels et plus de 200 stagiaires), de plus de 70 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

Poste situé dans un secteur relevant de la protection du potentiel scientifique et technique (ZRR (zone à régime restrictif)) et nécessitant, conformément à la réglementation, une autorisation par l'autorité compétente du Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche.

Modalités de candidature

Adresser CV, lettre de motivation accompagnée des noms de 2 références et relevés de notes (de deux dernières années d'études) à :

Pr. Vladimir Esin, vladimir.esin@univ-lorraine.fr

Dr. Maeva Cottura, maeva.cottura@univ-lorraine.fr