

PhD Position – Material Science

Study of boron effects on the thermodynamic properties of high-strength steels

High-strength steels grades contain small amount of boron, less than 40 ppm by mass, in order to suppress liquid metal embrittlement. But the addition of boron leads to difficulties during solidification in continuous casting. The formation of slab defects could result from a metatectic type transformation of ferrite δ into austenite γ , leading to a retrograde melting during cooling. However, existing thermodynamic databases, which could support the optimization of processing conditions, do not cover the composition and temperature ranges considered for the targeted application. This knowledge is essential for optimizing the chemistry of grades under development, as well as for adjusting processing parameters in order to limit or even avoid these defects. This study could also serve as a guide to support the use of scrap from recycling as part of the necessary decarbonization of steelmaking processes.

The aim of this thesis study is to develop:

- a coherent description of the thermodynamics of the Fe-B-X system ($X=C, Mn(Si, Al)$) and the limits of the phase stability domains as a function of temperature, based on experimental data for ferritic and austenitic solid solutions in equilibrium with the liquid phase.
- a thermodynamic database in the Calphad formalism for calculating these phase boundaries. The specificity of this database is that it should enable phase equilibria to be calculated with a high degree of accuracy, for the compositional domains and temperature ranges considered for the target application, with B additions not exceeding 40 ppm by mass and temperatures for which the liquid phase is present.

To acquire missing data on the systems of interest, experiments using different thermal analysis techniques and isothermal conditions will be carry out in order to characterize phase stability domains, solidification paths and microstructure morphology.

All the knowledge acquired will be grouped in a model to help develop boron-added steel grades. It should enable to reliably and rapidly specify solidification behavior and control casting defects.

Requirements: Masters or engineers in "Materials Science" and/or "Materials Chemistry" and/or "Materials Physics" with solid knowledge in thermodynamics. The candidate should be motivated in both experimental approaches and numerical simulations.

Location: SIMaP laboratory at Saint Martin d'Hères (Laboratoire de Science et Ingénierie des Matériaux et Procédés, Grenoble INP, Université Grenoble Alpes) with short periods at ArcelorMittal Research Center, Maizières-les-Metz.

Duration: Starting time March 2024, duration 36 months.

PhD grant: In the framework of a CIFRE PhD program associating SIMAP laboratory and ArcelorMittal Research Center, Maizières-les-Metz.

Contacts:

SIMaP: annie.antoni@grenoble-inp.fr (TOP research group) celine.pascal@grenoble-inp.fr (PM research group)
ARCELORMITTAL GANDRANGE - Etablissement de Maizières-Les-Metz: evangelina.ahtoy@arcelormittal.com

Proposition de thèse

Etude de l'impact du bore sur les propriétés thermodynamiques d'aciers à haute résistance

Dans les nouvelles chimies des aciers à haute résistance, le bore est ajouté en très faible quantité (< 40 ppm massique) notamment afin d'éviter certaines problématiques de type LME (Liquid Metal Embrittlement, fragilisation par diffusion de métal liquide). Toutefois, la présence de B entraîne la formation de défauts sur brame (craques internes ségréguées, fissuration) lors de la solidification à la coulée continue. Ces défauts trouveraient leur origine dans les transformations de phases au refroidissement, en particulier la réaction métatectique ainsi que la transformation de la ferrite en austénite et liquide à moyenne température. Cependant, la thermodynamique de ces systèmes, notamment pour de faibles teneurs en B et en présence de liquide est mal définie. Cette connaissance est essentielle pour optimiser la chimie des nuances en cours de développement ainsi que l'ajustement des paramètres d'élaboration afin de limiter voire d'éviter ces défauts. Cette étude pourra aussi servir de guide lors de l'élaboration des aciers à partir du recyclage de ferrailles dans le cadre de la limitation des émissions de gaz à effet serre.

L'objectif du travail de thèse est de développer :

- une description cohérente de la thermodynamique du système Fe-B-X (X=C,Mn(Si,Al)) et des limites des domaines de stabilité des phases en fonction de la température à partir de données expérimentales établies pour les solutions solides ferritique et austénitique en équilibre avec la phase liquide.
- une base de données thermodynamiques dans le formalisme Calphad permettant de calculer ces limites de phases. La spécificité de cette base est qu'elle devra permettre de calculer des équilibres de phases avec un haut degré de précision, pour les domaines de composition et des gammes de températures considérés pour l'application visée, avec des ajouts de B ne dépassant pas 40 ppm massique et des températures pour lesquelles la phase liquide est présente.

Pour acquérir des données manquantes sur les systèmes d'intérêt, des expériences utilisant différentes techniques d'analyse thermique et en conditions isothermes seront mises en œuvre afin de caractériser les domaines de stabilité des phases, les chemins de solidification et la morphologie des microstructures.

L'ensemble des connaissances acquises sera capitalisé dans un modèle d'aide à l'élaboration de nuances d'aciers avec ajout de bore. Il devra permettre de préciser de façon fiable et rapide le comportement à la solidification, et le contrôle des défauts à la coulée.

Profils recherchés :

Masters ou ingénieurs spécialisés en "Science des matériaux" et/ou "Chimie des matériaux" et/ou "Physique des matériaux", avec des bases solides en thermodynamique. La/le candidate/candidat devra avoir un intérêt à la fois pour les approches expérimentales et pour les simulations numériques.

Conditions :

La thèse CIFRE d'une durée de 3 ans s'effectuera principalement au laboratoire SIMaP (Laboratoire de Science et Ingénierie des Matériaux et Procédés, Université Grenoble Alpes). Des séjours réguliers sont prévus sur le site de la société ArcelorMittal (Research Center de Maizières-les-Metz)

Début de thèse à partir de mars 2024

Contacts :

SIMaP : annie.antoni@phelma.grenoble-inp.fr (équipe TOP) celine.pascal@grenoble-inp.fr (équipe PM)

ARCELORMITTAL GANDRANGE - Etablissement de Maizières-Les-Metz : evangelina.ahtoy@arcelormittal.com