

Sujet de stage

Département Physique et Mécanique des Matériaux – Equipe PDP

Interactions macles – interfaces bi-métalliques : simulations à l'échelle atomique

Encadrants : S. Brochard et J. Durinck

Mots-clés : macles, dislocations, simulations à l'échelle atomique, interfaces

Sujet :

Contexte :

Les matériaux nano-structurés ont souvent des propriétés physiques différentes de leurs homologues sous forme massive. Dans de tels matériaux, la densité d'interfaces est particulièrement grande, de sorte que le rôle de ces interfaces devient prédominant par rapport au volume. En particulier, les interfaces gouvernent les propriétés mécaniques dans le cas de matériaux nano-maclés ou nano-lamellaires.

Ainsi, une meilleure compréhension des interactions entre les interfaces et différents types de défauts étendus (p. ex. dislocations, macles) produits sous sollicitation mécanique s'avère nécessaire afin d'optimiser la nano-structuration.

Les simulations à l'échelle atomique telles que la dynamique moléculaire, sont des outils particulièrement bien adaptés à ce type d'étude, du fait des longueurs caractéristiques des systèmes et des mécanismes considérés.

C'est dans ce contexte que s'inscrivent le stage de master et la thèse proposés.

Sujet du stage de master :

Le stage de master sera focalisé sur le système bi-métallique cuivre/argent. Dans de tels matériaux obtenus par des procédés de déformation plastique sévère, la co-existence de différents types d'interface a été montrée expérimentalement [1] (figure 1). L'étude de l'interaction de macles avec chacune de ces interfaces a été réalisée via des simulations à l'échelle atomique en considérant la déformation de systèmes avec une interface isolée et des surfaces délimitant un film mince bi-métallique [2]. Lors du stage de master, on s'intéressera au cas où co-existent plusieurs interfaces, de même nature (dans un premier temps) ou de natures différentes. Le rôle des surfaces sera ainsi minimisé et « l'échantillon numérique » s'approchera davantage d'un échantillon réel. On portera une attention particulière au comportement global du système et à l'identification de mécanismes inédits de formation ou d'extension de macles au cours de la déformation plastique, en particulier dans le cas de l'interface dite « heterotwin », relativement imperméable aux macles.

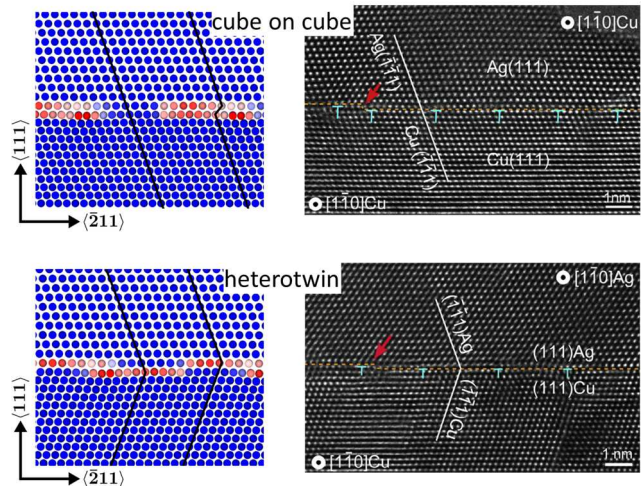


Figure 1 : différents types d'interface dans le système Ag/Cu. Les images de microscopie électronique (à droite) sont issues de [1]

Poursuite en thèse :

Cette étude pourra se poursuivre lors d'une thèse. Plusieurs axes de recherche seront alors envisagés, dans le but notamment de rendre la comparaison avec les expériences plus pertinente :

- complexification des configurations d'interface ;
- étude du rôle de défauts à l'interface, tels que des marches (comme celles indiquées par les flèches rouges sur les images de la figure 1) ;
- extension à d'autres bi-métaux (cfc/cfc ou cfc/cc) ;
- test de l'influence de la vitesse de déformation (cas des mécanismes les plus simples) via l'utilisation d'une méthode de dynamique moléculaire accélérée et / ou calculs NEB.

Références :

[1] Zheng S.J. et al., *Acta Materialia* **79** (2014) p. 282

[2] Béjaud R., thèse de l'université de Poitiers (2017)