

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

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

Contacts : S. Brochard (sandrine.brochard@univ-poitiers.fr - +33 5 49 49 68 33)
J. Durinck (julien.durinck@univ-poitiers.fr - +33 5 49 49 66 50)

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'inscrit la thèse proposée.

Sujet :

La thèse sera focalisée dans un premier temps 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 de la thèse, on s'intéressera d'abord au cas où co-existent plusieurs interfaces, de même nature 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.

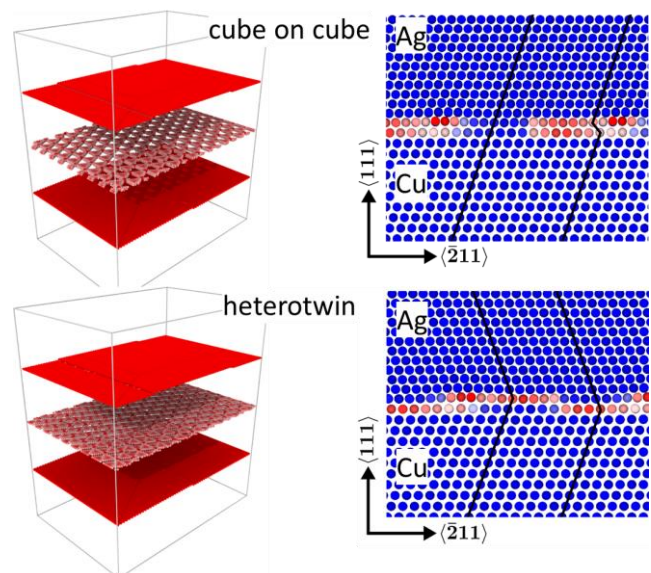


Figure 1 : les deux types d'interface dans le système Ag/Cu.

L'étude se poursuivra selon plusieurs axes de recherche, 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 (défauts observés expérimentalement [2]) ;
- 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)

Laboratoire d'accueil :

Institut PPRIME (<https://www.pprime.fr>) – Futuroscope-Chasseneuil (15 km de Poitiers)
Equipe Physique des Défauts et Plasticité (PDP)
et équipe Surface, Interfaces et MATériaux sous Contrainte (SIMAC)

Financement : le salaire net sera de l'ordre de 1450€/mois.

Date de début : à partir de septembre 2019

Profil du candidat : nous recherchons un(e) candidat(e) diplômé(e) de master, ayant une solide formation en physique de l'état solide ou des matériaux et un fort intérêt pour les simulations numériques sur ordinateur. Des compétences en simulations à l'échelle atomique, en particulier en dynamique moléculaire, seront un atout.

Candidature : pour candidater, envoyer un CV et une lettre de motivation aux contacts mentionnés en en-tête de l'offre avant mars 2019.

Twin-interface interactions in bi-metallic systems: atomic scale simulations

Keywords: twins, dislocations, atomic scale simulations, interfaces

Contacts: S. Brochard (sandrine.brochard@univ-poitiers.fr - +33 5 49 49 68 33)
J. Durinck (julien.durinck@univ-poitiers.fr - +33 5 49 49 66 50)

Context:

Nanostructured materials often exhibit physical properties different from those of their bulk counterparts. In such materials, the fraction of interfaces is so large that it may govern physical properties. In particular, mechanical properties are strongly influenced by interfaces in nano-lamellar and nano-twinned materials.

Thus, it appears necessary to gain insight into the interactions between interfaces and extended defects (such as dislocations and mechanical twins) with the aim to improve the nanostructure of plastically deformed materials. In this context, molecular dynamics simulations are atomic scale tools well suited for figuring out interaction mechanisms.

PhD program:

In a first step, the PhD thesis will be devoted to the study of nanostructured Cu/Ag systems. These materials, which are elaborated using Severe Plastic Deformation processes, were found containing two different kinds of interfaces [1] (figure 1). In order to study the interaction between mechanical twins and interfaces of both kinds, atomistic simulations have already been performed in bimetallic Cu/Ag thin films containing only one interface and two free surfaces [2]. To go further, the PhD student will have to consider multi-layered systems containing interfaces of only one or the two kinds, minimizing the role of free surfaces so that the numerical samples are brought closer to experimental ones. She/he will have to study the global response of the whole system and to identify new elementary mechanisms involved in the formation and extension of mechanical twins during plastic deformation. A special attention will be given to the « heterotwin » interface, which is a strong obstacle for the transmission of twins from one part of the film to the other.

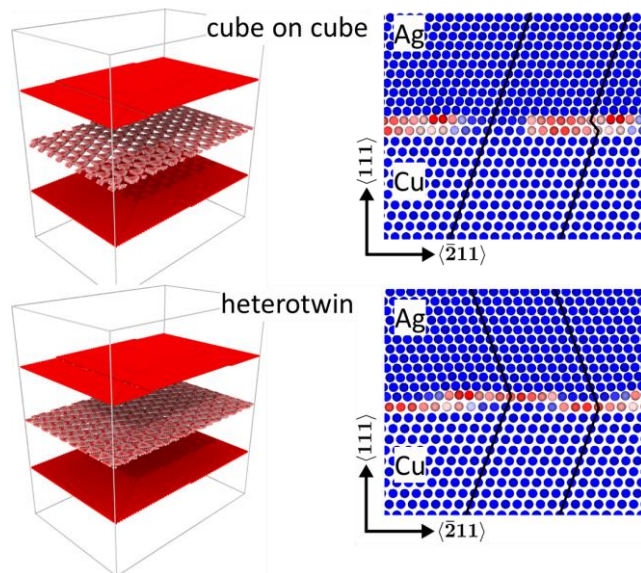


Figure 1 : the two kinds of interfaces in Ag/Cu systems.

In a second stage, the PhD work will continue following several possible axes consisting of:

- considering more complex interfaces distributions,
- studying the role of defects at the interface, such as atomic steps (such interface defects are observed experimentally [2]),
- extending the study to other metal/metal interfaces (fcc/fcc or bcc/fcc),
- assessing the influence of strain rate using accelerated molecular dynamics techniques and/or Nudged Elastic Band calculations.

Références:

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

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

Working laboratory: Institut PPRIME (<https://www.pprime.fr>) – Futuroscope-Chasseneuil
(15 km from Poitiers city, France)

Funding: salary for the PhD student will be ~1450€/month after taxes.

Dates: from September 2019

Required skills/qualification: the applicant should hold a master degree in solid-state physics or material science. He/she should show a strong interest in computer simulations. Atomic-scale simulations skills, especially in molecular dynamics, will be an asset.

Application: send a CV and a cover letter to S. Brochard (sandrine.brochard@univ-poitiers.fr) and J. Durinck (julien.durinck@univ-poitiers.fr) before March 2019.