

Offre de stage de master 2

Département Physique et Mécanique des Matériaux – Equipe PDP et SIMAC

Simulations à l'échelle atomique de films minces d'or nanomacés

Encadrants : Sandrine BROCHARD et Julien DURINCK

Mots-clés : macles, simulations à l'échelle atomique, films minces

Contexte :

Une macle est une portion de cristal ayant une orientation particulière, obtenue par exemple par réflexion, par rapport à la matrice de même structure cristalline. Les macles peuvent apparaître lors de la déformation plastique (macles de déformation), mais aussi en cours de croissance ou de recristallisation. Ces dernières années, les matériaux nanomacés ont été l'objet d'un grand intérêt du fait de leurs remarquables propriétés mécaniques. Ils allient en effet une bonne résistance mécanique, une bonne ductilité et un durcissement, et ce sans perte des propriétés électriques (résistivité identique à celle des matériaux à gros grains) [1].

C'est dans ce contexte, que s'inscrit le projet « PtyMet », dont un des objectifs est de caractériser le champ de contrainte dans des films minces nanomacés et ses conséquences sur leurs propriétés physiques, en combinant expériences (diffraction des rayons X et microscopie électronique en transmission) et simulations (statique et dynamique moléculaire). Les modèles d'étude pour ce projet sont des films minces nanomacés d'or, obtenus expérimentalement au laboratoire (figure 1 (a) et (b)).

Du point de vue numérique, les simulations à l'échelle atomique sont des outils particulièrement bien adaptés à ce type d'étude, permettant de décrire avec précision les configurations de défauts (p. ex. dislocations, joints de grains, macles, voir figure 1 (c)) et contenant naturellement des propriétés clés des matériaux telles que les énergies de défaut d'empilement ou de joint de macle. De plus, les simulations à l'échelle atomique et les expériences tendent à converger vers des échelles de taille similaires (figure 1).

Sujet du stage de master :

Le but du stage sera d'établir, via des simulations à l'échelle atomique, le champ de déplacement élastique associé à différentes structures de films minces d'or nanomacés. Les configurations d'équilibre des films seront calculées en utilisant des potentiels semi-empiriques fiables pour l'or. Dans un premier temps, une configuration simple avec une seule macle et des conditions aux limites périodiques sera envisagée, afin de déterminer l'influence de la densité de macles, de l'épaisseur et de la longueur de l'échantillon. Par la suite, des systèmes plus sophistiqués et plus grands seront considérés, avec deux macles (ou plus) de différentes orientations.

Poursuite en thèse :

Cette étude a vocation à se poursuivre lors d'une thèse financée par le projet « PtyMet », porté par Pierre Godard (équipe SIMAC de l'institut PPRIME). Cette thèse associera les aspects numériques et expérimentaux, notamment en utilisant les résultats des simulations pour générer des clichés de diffraction cohérente des rayons X et les comparer aux clichés expérimentaux. L'étude par dynamique moléculaire de la déformation des différentes configurations de films minces nanomacés est également envisagée.

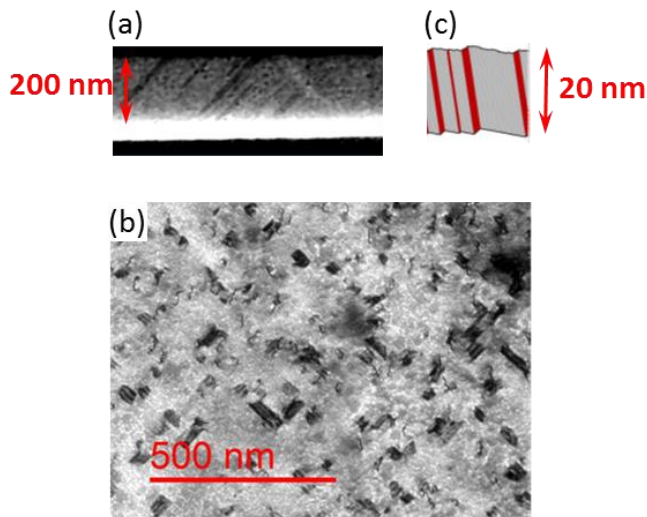


Figure 1 : films minces nanomacés :

(a) Image MEB (coupe transverse) d'un film mince d'or obtenu expérimentalement par dépôt à 225°C. Les zones sombres traversant le film correspondent aux macles.

(b) Image MET (vue plane) d'un film mince d'or de 50 nm d'épaisseur obtenu expérimentalement par dépôt à 400°C. Les zones rectangulaires noires correspondent aux macles.

(c) Image issue de simulations à l'échelle atomique (dynamique moléculaire) d'un film mince d'aluminium déformé à 6,3% [2]. Les macles, formées aux surfaces, sont mises en évidence en rouge.

[1] Lu et al., *Science* **304**, 422 (2004).

[2] Béjaud et al., *Computational Materials Science* **145**, 116 (2018).

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)

Gratification : l'étudiant stagiaire recevra une gratification selon le tarif légal de la fonction publique (15% du plafond horaire de la sécurité sociale).

Durée du stage : 4 à 6 mois entre février 2020 et fin septembre 2020

Profil du candidat : nous recherchons un(e) étudiant(e) de master deuxième année ou en dernière année d'école d'ingénieur ayant une solide formation en physique des matériaux et un intérêt pour les simulations numériques sur ordinateur. Pour candidater, envoyer un CV et une lettre de motivation aux contacts ci-dessous.

Contact:

Sandrine BROCHARD +33 (0)5 49 49 68 33

Julien DURINCK +33 (0)5 49 49 66 50

Pierre GODARD +33 (0)5 49 49 67 46

sandrine.brochard@univ-poitiers.fr

julien.durinck@univ-poitiers.fr

pierre.godard@univ-poitiers.fr