

## Sujet de thèse

---

# Déformation plastique par diffusion aux échelles nanométriques

---

Lorsque les dimensions caractéristiques des matériaux diminuent pour atteindre les échelles nanométriques, leurs propriétés deviennent de plus en plus dépendantes des surfaces, et de moins en moins des volumes. Par exemple, des nano-objets tels que les nanofils ou les nanoparticules sont très résistants à la déformation, car il y a peu, voire pas du tout, de défauts déjà présents en volume pouvant faciliter la plasticité. Les expériences et les simulations montrent qu'il est nécessaire de créer de nouveaux défauts à partir des surfaces, ce qui nécessitent des contraintes appliquées très importantes. Des travaux récents ont montré qu'en deçà d'une certaine taille, un autre mode de déformation plastique pouvait être activé sous contrainte, dans lequel la diffusion atomique en surface du nano-objet (ou à l'interface avec le système appliquant la contrainte) jouait un rôle central [1]. Dans ces conditions, le nano-objet, généralement métallique, semble se comporter comme un liquide, avec une répartition par diffusion de la matière permettant de relaxer les contraintes. Ce mode n'a pour l'instant pas fait l'objet d'études poussées, et reste de fait assez mystérieux. Un obstacle majeur est qu'il se produit à des dimensions inférieures à la dizaine de nanomètres, ce qui rend les expériences difficiles. Un autre problème est qu'il s'agit d'un mécanisme diffusif, ce qui le rend difficile à modéliser avec une technique comme la dynamique moléculaire.

On se propose ici d'étudier ce mode de déformation en utilisant une approche de type ART-nouveau. Celle-ci permet une exploration rapide du paysage énergétique par la recherche des états de transition. Les événements de diffusion peuvent donc être systématiquement déterminés pour les atomes de surface, et ce en présence d'une contrainte appliquée. On se focalisera initialement sur une nanoparticule aluminium modélisée par un potentiel EAM, dont nous connaissons déjà le mode de plasticité par nucléation de dislocation [2]. Un premier objectif sera de tester l'utilisation de la méthode ART-nouveau pour cette problématique, et de développer les outils pour automatiser les recherches des états de transition et l'exploitation des données. Dans un second temps, des calculs Monte Carlo cinétique (KMC) pourront ensuite être réalisés à partir de cette base de données pour déterminer la dynamique de diffusion à une température donnée, et ainsi acquérir une vue complète du mécanisme de plasticité par diffusion et des conditions (dimensions, températures) dans lesquelles il est favorisé, ainsi que de la transition vers un mécanisme de déformation plastique par nucléation de dislocations. En fonction de l'avancement du sujet, il sera possible d'étudier un autre système (nanofil) ou un autre matériau (BCC par exemple).

L'encadrement au cours de la thèse sera formellement assuré par Laurent Pizzagalli, Directeur de recherche au CNRS. Pour autant, la candidate ou le candidat pourra interagir localement étroitement avec plusieurs chercheurs et enseignants chercheurs, spécialistes de méthodes numériques et impliqués sur des sujets de recherche proches. Elle/Il bénéficiera ainsi d'un environnement scientifique idéal pour mener à bien cette thèse. Par ailleurs, cette thématique de recherche fait l'objet d'une collaboration avec le groupe du Pr. Felipe Valencia, à l'Université de Maule à Talca (Chili). Dans ce cadre, un séjour au sein de ce groupe est envisageable.

[1] Sun et al, Nature Materials **13**, 1007 (2014)

[2] L. Pizzagalli et al, Scripta Materialia 241, 115863 (2024)

### Profil souhaité

Cette thèse repose exclusivement sur la réalisation de simulations numériques, et se fait devant un ordinateur dans un environnement Linux. Pour atteindre les objectifs visés, il faudra utiliser des outils numériques variés, et manipuler un grand nombre de données. Ceci nécessitera la réalisation de petits codes Python. Il est donc nécessaire d'être très à l'aise avec ces outils informatiques, et ne pas être allergique à la programmation de manière générale. La curiosité scientifique, des qualités d'analyse, de synthèse, et de communication, sont également souhaitables.

### Contacts :

Laurent Pizzagalli

[Laurent.Pizzagalli@univ-poitiers.fr](mailto:Laurent.Pizzagalli@univ-poitiers.fr)