

Sujet de thèse

Année universitaire 2026

Etude de la déformation plastique par diffusion aux échelles nanométriques

Encadrant(s)	Laurent Pizzagalli		
Equipe(s)	PDP		
Mots clés	Nanoparticules	Diffusion	Métaux
	Simulations numériques	Plasticité	

Description du sujet

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 expériences récentes ont montré qu'en deça 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 diverses approches plus adaptées à la modélisation des mécanismes de diffusion. Initialement on se focalisera sur la méthode 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. 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. 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. La répétition de cette procédure pour des contraintes appliquées et des tailles diverses permettra aussi de cerner les conditions favorables (dimensions, températures) à ce mode de déformation.

En fonction de l'avancement des travaux, il est envisagé de mettre en œuvre d'autres techniques numériques (Monte Carlo atomique, Parallel Replica Dynamics, Temperature Accelerated Dynamics) adaptées à l'étude des mécanismes de diffusion.

Au cours de la thèse, on se focalisera sur des nanoparticules métalliques de structure cubique faces centrées, modélisés par des potentiels EAM, dont nous connaissons déjà le mode de plasticité par nucléation de dislocation [2].

[1] Ding et al, Acta Materialia **293**, 121092 (2025)

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

Profil du candidat

La thèse repose exclusivement sur la réalisation de simulations numériques, 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 à l'aise avec l'informatique, 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