

### **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](mailto:sandrine.brochard@univ-poitiers.fr) - +33 5 49 49 68 33)  
J. Durinck ([julien.durinck@univ-poitiers.fr](mailto: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 le stage de master proposé.

**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.

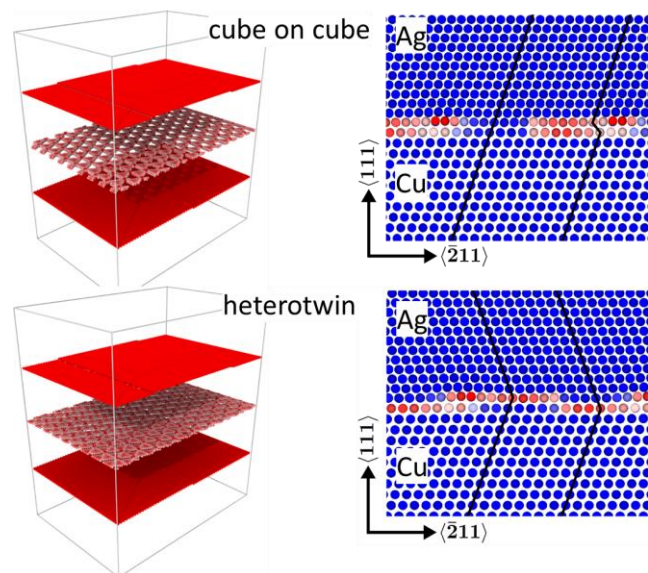


Figure 1 : les deux types d'interface dans le système Ag/Cu.

**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)

**Gratification :** le stage de master 2 est financé par le projet LABEX INTERACTIFS piloté par l'institut PPRIME à hauteur d'approximativement 570 €/mois.

**Durée du stage :** 4 à 6 mois entre mars 2019 et fin septembre 2019

**Possibilité de poursuite en thèse :** oui

**Profil du candidat :** nous recherchons un(e) étudiant(e) de master deuxième année 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 mentionnés en en-tête de l'offre.