

## PhD offer (version française pages suivantes)

Physics and Mechanics of Materials Department – PDP and SIMAC teams

### *Mechanical properties of nanotwinned gold thin films*

**Supervisors:** Sandrine BROCHARD and Pierre GODARD

**Keywords:** twins, thin films, atomic scale simulations, X-ray diffraction, synchrotron radiation

**Context:**

A twin is a portion of a crystal with a particular orientation, for example obtained by a reflection, with respect to a matrix with the same crystalline structure. Twins may appear during plastic deformation, crystal growth or recrystallization. During the last years, nanotwinned materials have been the subject of great interest due to their remarkable mechanical properties: they present large mechanical resistance, ductility and work-hardening capacities. Moreover, they have the same electrical resistivity as coarse grain crystals [1].

In this context, the "PtyMet" project aims at characterizing the stress field in nanotwinned thin films, and its impact on physical properties. We will combine experiments (X-ray diffraction and transmission electron microscopy) and simulations (molecular statics and dynamics) and focus on single-crystalline nanotwinned gold thin films prepared in our laboratory (figure 1 (a) and (b)).

From a numerical point of view, atomistic scale simulations are particularly well adapted tools for these studies. They include key materials properties such as the stacking fault and twin boundary energies, allowing precise descriptions of the defect configurations (e.g. dislocations, grain boundaries, twins, figure 1 (c)). Furthermore, atomic scale simulations and experiments are now working on converging spatial scales (figure 1).

From the experimental point of view, X-ray diffraction can be used to determine the twinned volume (via pole figures) or the stress state in the sample (via Bragg peaks displacement). Moreover, using a coherent X-ray beam allows the characterization of single crystalline defects such as dislocations or twins.

**PhD program:**

Optimization of the deposition conditions is mandatory in order to prepare homogeneous thin films, without other defects than the twins. The films' microstructure before deformation will be precisely characterized.

Simultaneously, atomic scale simulations will be used to establish the elastic strain field associated with different nanotwinned thin film microstructures. Equilibrium conditions will be determined using semi-empirical potentials, that are reliable for gold. The impact of the twins' density and thickness will be studied.

Finally, in-situ tensile tests at synchrotron radiation sources, using both classical and coherent X-ray diffraction, will be performed. This, together with atomic scale simulations, will allow a full characterization, from the atomic to the macro-scale, of the mechanical properties of nanotwinned gold thin films.

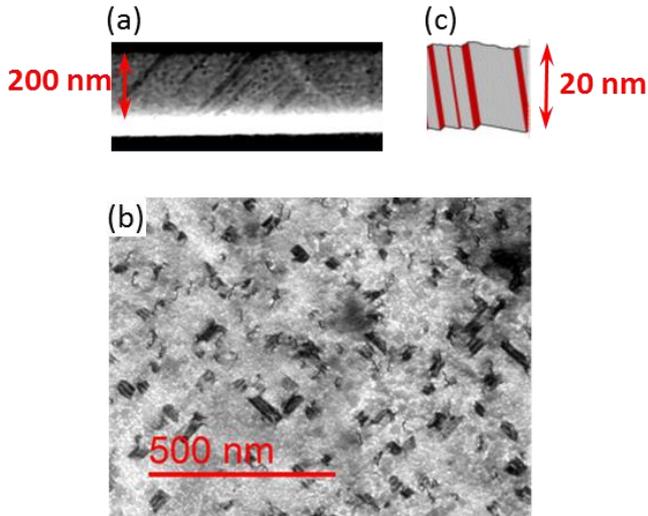


Figure 1: nanotwinned thin films  
 (a) Scanning electron microscopy image (cross-section) of a gold thin film. The dark areas cutting the film are twins.  
 (b) Transmission electron microscopy (plane view) of a 50 nm thick gold thin film. The dark rectangles are twins [2].  
 (c) Image from an atomic scale simulation (molecular dynamics) of an aluminium film strained to 6.3% [3]. Twins, nucleated at the surface, are highlighted in red.

- [1] Lu et al., *Science* **304**, 422 (2004).  
 [2] Drieu La Rochelle et al., *Surface and Coatings Technology* **377**, 124878 (2019).  
 [3] BÉJAUD et al., *Computational Materials Science* **145**, 116 (2018).

**Working laboratory:** Institut PPRIME (<https://www.pprime.fr>) – Futuroscope-Chasseneuil (15 km from Poitiers city, France), Physique des Défauts et Plasticité (PDP) and Surface, Interfaces et MATériaux sous Contrainte (SIMAC) teams

**Required skills/qualification:** the applicant should hold a master degree in solid-state physics or materials science. He/she should show a shared interest in computer simulations and in experimental work. Skills in atomic scale simulations and / or X-ray diffraction will be an asset.

**Application:** send a CV and a cover letter to the contacts below.

**Contact:**

Sandrine BROCHARD +33 (0)5 49 49 68 33 [sandrine.brochard@univ-poitiers.fr](mailto:sandrine.brochard@univ-poitiers.fr)  
 Pierre GODARD +33 (0)5 49 49 67 46 [pierre.godard@univ-poitiers.fr](mailto:pierre.godard@univ-poitiers.fr)

## Offre de thèse

Département Physique et Mécanique des Matériaux – Equipes PDP et SIMAC

### ***Propriétés mécaniques de films minces d'or nanomaclés***

**Encadrants :** Sandrine BROCHARD et Pierre GODARD

**Mots-clés :** macles, films minces, simulations à l'échelle atomique, diffraction des rayons X, rayonnement synchrotron

#### **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 nanomaclés 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 nanomaclés 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 nanomaclés d'or, obtenus expérimentalement au laboratoire par pulvérisation ionique (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).

Du point de vue expérimental, la diffraction des rayons X permet de connaître les fractions volumiques (via des figures de pôles) ou la répartition des contraintes (par la mesure de déplacement des pics de Bragg) entre les différentes phases de l'échantillon, la matrice et les macles dans notre cas. De plus, l'utilisation d'un faisceau cohérent offre la possibilité de suivre l'évolution de défauts cristallins individuels.

#### **Sujet de la thèse :**

Une optimisation des conditions de dépôt des films est nécessaire afin d'obtenir des échantillons homogènes et sans autre défaut que les macles. La microstructure avant déformation sera précisément caractérisée.

En parallèle, des simulations à l'échelle atomique détermineront le champ de déplacement élastique associé à différentes structures de films minces d'or nanomaclés. Les configurations d'équilibre des films seront calculées en utilisant des potentiels semi-empiriques fiables pour l'or. L'influence de la densité de macles, de l'épaisseur et de la longueur de l'échantillon sera étudiée.

Enfin, des tests de traction seront effectués, en synchrotron, sous faisceaux de rayons X classiques ou cohérents. On espère ainsi caractériser les propriétés mécaniques de ces films

d'or nanomaclés, de l'échelle atomique par les simulations, à l'échelle macroscopique par la diffraction classique, en passant par une échelle intermédiaire offerte par la diffraction de faisceaux cohérents.

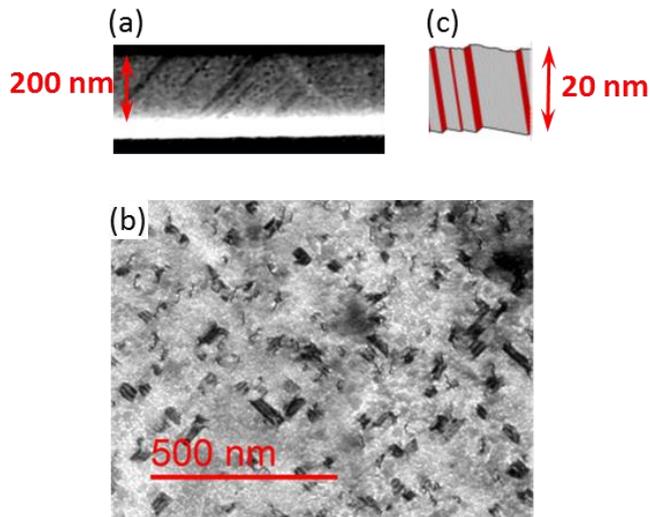


Figure 1 : films minces nanomaclés :  
 (a) Image MEB (coupe transverse) d'un film mince d'or obtenu expérimentalement par dépôt à 225°C. Les zones sombres traversant le film correspondent aux macles.  
 (b) Image MET (vue plane) d'un film mince d'or de 50 nm d'épaisseur obtenu expérimentalement par dépôt à 400°C. Les zones rectangulaires noires correspondent aux macles [2].  
 (c) Image issue de simulations à l'échelle atomique (dynamique moléculaire) d'un film mince d'aluminium déformé à 6,3% [3]. Les macles, formées aux surfaces, sont mises en évidence en rouge.

- [1] Lu et al., *Science* **304**, 422 (2004).  
 [2] Drieu La Rochelle et al., *Surface and Coatings Technology* **377**, 124878 (2019).  
 [3] Béraud et al., *Computational Materials Science* **145**, 116 (2018).

**Laboratoire d'accueil :**

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

**Profil du candidat :**

Nous recherchons un(e) étudiant(e) titulaire d'un master deuxième année ou d'un diplôme d'ingénieur ayant une solide formation en physique des matériaux et un intérêt partagé pour les simulations numériques sur ordinateur et pour l'expérience. Pour candidater, envoyer un CV et une lettre de motivation aux contacts ci-dessous.

**Contact:**

Sandrine BROCHARD +33 (0)5 49 49 68 33 [sandrine.brochard@univ-poitiers.fr](mailto:sandrine.brochard@univ-poitiers.fr)  
 Pierre GODARD +33 (0)5 49 49 67 46 [pierre.godard@univ-poitiers.fr](mailto:pierre.godard@univ-poitiers.fr)