

Simulations *ab initio* des propriétés mécaniques de nanoparticules très très petites

Sandrine BROCHARD^{1*}, Julien DURINCK¹, Julien GODET¹, Jean FURSTOSS¹,
Felipe VALENCIA², Laurent PIZZAGALLI¹

¹Institut PPRIME, Université de Poitiers, ISAE-ENSMA, CNRS, Poitiers, France

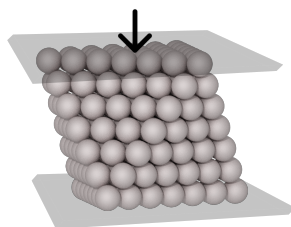
²Departamento de Computación e Industrias, Facultad de Ciencias de la Ingeniería, Universidad Católica del Maule, Talca, Chile

*sandrine.brochard@univ-poitiers.fr

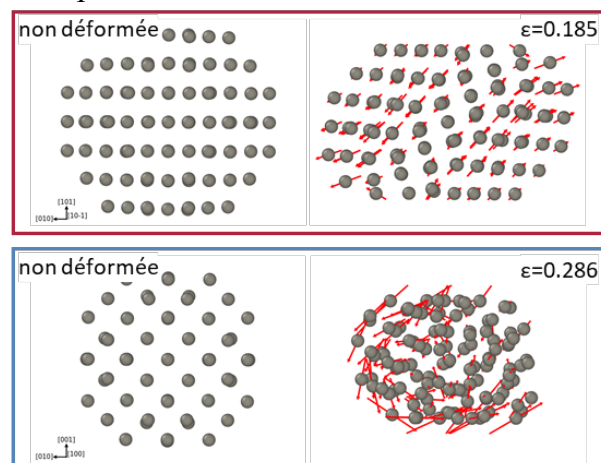
Conférence invitée

Il est maintenant bien établi, expérimentalement et via des simulations numériques, que la résistance des matériaux tend à augmenter quand la taille du système considéré diminue, jusqu'à des dimensions caractéristiques d'une dizaine de nanomètres. Ce qui est moins clair, c'est si cette augmentation persiste aux plus petites échelles, quand les dimensions sont encore plus réduites, jusqu'à quelques nanomètres.

Pour tenter de répondre à cette question, nous avons réalisé des simulations de dynamique moléculaire *ab initio* et examiné les propriétés mécaniques de nanoparticules avec des tailles de 1 à 2 nanomètres. L'utilisation de calculs basés sur les premiers principes offre la précision requise pour une telle investigation et vient compléter utilement les études expérimentales, en donnant un accès direct aux mécanismes de déformation. Les nanoparticules ont été comprimées le long de plusieurs directions, différentes formes ont été étudiées et des matériaux avec différentes structures cristallographiques ont été considérés : silicium, carbure de silicium, aluminium et tungstène. Les résultats obtenus montrent que la limite d'élasticité dépend de la forme des nanoparticules dans tous les cas, tandis que sa variation avec la taille dépend du matériau. La fameuse règle « smaller is stronger » ne semble plus valable pour certains systèmes, bien que la limite d'élasticité théorique puisse être parfois atteinte, voire dépassée. Dans la plupart des nanoparticules, l'amorphisation se produit, mais des mécanismes de plasticité originaux sont également observés dans certains cas. Ces mécanismes seront décrits et discutés lors de cette présentation.



Modélisation de la compression uniaxiale des nanoparticules.



Compression de nanoparticules de tungstène. Les flèches centrées sur les atomes sont proportionnelles aux déplacements atomiques cumulés. En haut : formation d'une macle pour une nanoparticule sphérique comprimée le long d'une direction $\langle 110 \rangle$. En bas : amorphisation pour une nanoparticule facettée (construction de Wulff) comprimée le long d'une direction $\langle 100 \rangle$.