

MASTER THESIS M2 CDM (5 months, Feb. - June)

2025-2026

Title of the project: Molecular Simulation of the Formation of TiO_x Nanoparticles in the Vapor Plume during Laser Welding**Supervisor(s):** R. RAMDANI

Location/ Laboratory / Department / Team : Laboratoire ICB (Institut Carnot de Bourgogne)

Département PMDM – Équipe LTM,

Collaborations: I. Tomashchuk, J.M. Jouvard**Summary:**

Le traitement des matériaux métalliques par des lasers à courte durée d'impulsion (tels que laser nanoseconde) est une technologie flexible et versatile permettant de produire les morphologies variées de la surface associées avec l'insertion des éléments légers tels que l'oxygène et l'azote. La modification de la rugosité et de la nature chimique de la surface du titane ouvre de vastes possibilités de contrôler sa mouillabilité, sa photoréactivité ou encore sa biocompatibilité. Dans le même temps, le traitement laser produit abondamment des nanoparticules d'oxydes de titane, qui posent le problème de pollution et dont les mécanismes de formation ne sont pas complètement élucidés. L'interaction intense entre le faisceau laser et la surface métallique provoque une vaporisation locale du matériau, suivie de la condensation de nanoparticules, qui évoluent ensuite dans le milieu ambiant et subissent des réactions chimiques complexes conduisant à la formation d'oxydes ou d'hydroxydes de titane. Comprendre à l'échelle atomistique ces phénomènes de nucléation, de croissance et d'oxydation est fondamental pour optimiser les procédés de traitement de surface par laser et limiter les effets indésirables liés à la pollution particulaire. Lors du traitement laser à l'air, ces nanoparticules retombent partiellement sur le substrat fondu, alors que lors du traitement dans l'eau elles forment une suspension qui précipite au bout de quelques heures et peut être analysée par MET et MEB.

Ce stage propose d'utiliser la dynamique moléculaire pour simuler la phase vapeur de titane dans des conditions extrêmes de température et de pression, caractériser les mécanismes de nucléation et de croissance des nanoparticules de TiO_x , et analyser leurs interactions avec différents environnements réactifs, en mettant l'accent sur l'oxydation dans l'air et en présence d'eau, afin d'identifier les conditions favorables à la stabilisation de différentes phases métalliques ou oxydées. Les résultats attendus incluent une meilleure compréhension atomistique des processus de condensation et d'oxydation, la distinction des comportements spécifiques entre atmosphère gazeuse et milieu aqueux, et des pistes pour contrôler la composition chimique et la structure des nanoparticules.

Le stage permettra à l'étudiant(e) de développer des compétences solides en simulation numérique et en analyse structurale et thermodynamique des matériaux, ainsi qu'une compréhension approfondie des procédés laser et de la physico-chimie du titane, tout en travaillant dans un projet interdisciplinaire à l'interface entre matériaux, simulation et physique des plasmas. Ce stage s'adresse à un(e) étudiant(e) de Master 2 en physique, chimie, science des matériaux ou nanosciences, motivé(e) par la simulation numérique et l'analyse de données, et se déroulera au Laboratoire ICB – Département PMDM – Équipe LTM, Université de Bourgogne – IUT du Creusot, pour une durée de 5 mois.

Type of project (theory / experiment): theory**Required skills:** Structural and thermodynamic analysis of materials, Molecular dynamics, atomistic simulation, nanoparticles, oxidation