

PhD thesis:**Systematic study of mechanisms of plastic deformation
in perovskite oxides by numerical modeling**

Oxides with the perovskite structure can accommodate a wide range of chemical compositions, allowing them to exhibit a great variety of functional responses and technological applications. Titanates possess excellent dielectric response, and are used in condensators, detectors and actuators. Ferroelectrics can retain an information in the form of an electric polarization, making them ideal for designing memories for computers and smartphones. Other perovskites offer good ionic conductivity and are good candidates as electrolytes for lithium-ion batteries or fuel cells.

Since the middle of the 2000s, dislocations are seriously considered as a way to enhance the functional response of this class of materials. For instance SrTiO_3 is insulating in its bulk form, but can become conducting if dislocations are present. Dislocations also offer easy pathways for the diffusion of ions, enhancing the performance of electrolytes.

The goal of this PhD thesis will be to model dislocations in several perovskite materials with high application potential, and to study their role in plastic deformation. Molecular dynamics (with code LAMMPS) will allow simulating the mechanical behavior of these materials (stress-strain curves), and to determine the effects of chemical composition on the different mechanisms of plasticity (slip systems, Peierls barriers...). Finally, the role of dislocations in the functional response of some perovskites (ferroelectricity, diffusion) will be assessed.

Profile

You must have a Master 2 diploma in solid state matter or equivalent, with skills in materials sciences (crystallography, elasticity, plasticity, dislocations). A good knowledge in GNU/Linux systems as well as programming (C, Fortran or Python), are highly recommended. Skills in molecular dynamics (LAMMPS or other) would be appreciated.

Institution: University of Lille

Laboratory: Unité Matériaux Et Transformations (UMET) - <https://umet.univ-lille.fr/?&lang=en>

Research team: Plasticité – <https://umet.univ-lille.fr/Plasticite/?&lang=en>

Scientific area, Specialty: DS2 | Condensed matter, materials and devices

Access and security: the job takes place in a restricted area (ZRR). In agreement with French regulation, your access will have to be authorized by the competent authorities.

Desired beginning of PhD: October 1st, 2025

Duration of contract: 3 years

Salary: according to doctoral contract (about 2200 € /month)

To apply: send your CV, a motivation letter, and two contact details as references (Master teachers, internship supervisors), to:

Pierre Hirel

pierre.hirel@univ-lille.fr

Philippe Carrez

philippe.carrez@univ-lille.fr

Sujet de thèse :

**Étude systématique des mécanismes de plasticité
dans des oxydes perovskites par modélisation numérique**

Les oxydes à structure perovskite peuvent accommoder une large gamme de compositions chimiques, leur conférant des propriétés fonctionnelles et des applications technologiques très variées. Les titanates possèdent une excellente réponse diélectrique, et sont utilisés dans les condensateurs, détecteurs et actionneurs. Les ferroélectriques sont capables de retenir une information sous forme de polarisation électrique, ce qui les rend intéressants pour concevoir des mémoires d'ordinateurs ou de smartphones. D'autres perovskites offrent une bonne conductivité ionique et sont d'excellents candidats comme électrolytes pour les batteries lithium-ion ou les piles à combustible.

Depuis le milieu des années 2000, les dislocations sont sérieusement envisagées pour améliorer la réponse fonctionnelle de ces matériaux. Par exemple SrTiO_3 est isolant à l'état massif, mais peut devenir conducteur si des dislocations sont présentes. Les dislocations offrent aussi des chemins privilégiés pour la diffusion des ions, rendant les électrolytes plus performantes.

L'objectif de cette thèse sera de modéliser les dislocations dans plusieurs perovskites à haut potentiel applicatif, et d'étudier leur rôle dans la déformation plastique. La modélisation par dynamique moléculaire (code de calcul LAMMPS) permettra de simuler le comportement mécanique de ces matériaux (courbes contrainte-déformation), et de déterminer l'effet de la composition chimique sur les différents mécanismes de plasticité (systèmes de glissement, barrières de Peierls...). Enfin, le rôle des dislocations dans la réponse fonctionnelle de certaines perovskites (ferroélectricité, diffusion) sera évalué.

Profil recherché

Vous devez être titulaire d'un Master 2 de physique de la matière condensée ou équivalent, avec des compétences en matériaux (cristallographie, élasticité, plasticité, dislocations). Une bonne connaissance en systèmes GNU/Linux et en programmation (C, Fortran ou Python), sont fortement recommandées. Un savoir-faire en dynamique moléculaire (LAMMPS ou autre) serait apprécié.

Établissement : Université de Lille

Laboratoire de rattachement : Unité Matériaux Et Transformations (UMET) - <https://umet.univ-lille.fr/>

Équipe de rattachement : équipe Plasticité - <https://umet.univ-lille.fr/Plasticite/>

Domaine scientifique, Spécialité : DS2 | Milieux denses, matériaux et composants

Accès et sécurité : le poste se situe dans une zone à régime restrictif (ZRR). Conformément à la réglementation, votre accès doit être autorisé par l'autorité compétente du MESR.

Début souhaité de la thèse : 1er octobre 2025

Durée du contrat : 3 ans

Rémunération : contrat doctoral de droit public (env. 2200 € bruts/mois)

Pour postuler : envoyez votre CV, une lettre de motivation, et deux contacts de référence (enseignants de Master, encadrants de stage), à :

Pierre Hirel pierre.hirel@univ-lille.fr

Philippe Carrez philippe.carrez@univ-lille.fr