

---

# DMP du projet "Surface state and mechanics of nano-objects "

Plan de gestion de données créé à l'aide de DMP OPIDoR, basé sur le modèle "Science Europe : modèle structuré" fourni par Science Europe.

## Renseignements sur le plan

<b>Titre du plan</b>	DMP du projet "Surface state and mechanics of nano-objects "
<b>Livrable</b>	Livrable SASHA v1
<b>Version</b>	Version intermédiaire
<b>Domaines de recherche (selon classification de l'OCDE)</b>	Materials engineering, Nano technology
<b>Langue</b>	fra
<b>Date de création</b>	2022-03-22
<b>Date de dernière modification</b>	2022-03-22
<b>Identifiant</b>	DMP_SASHA_v20220322
<b>Type d'identifiant</b>	identifiant local
<b>Documents (publications, rapports, brevets, plan expérimental....), sites web associés</b>	<ul style="list-style-type: none"><li>• Paper : 10.1021/acsnano.1c02976</li><li>• SASHA webpage : <a href="https://sites.google.com/site/jonathanamodeoresearch/projects/anr-sasha">https://sites.google.com/site/jonathanamodeoresearch/projects/anr-sasha</a></li></ul>

## Renseignements sur le projet

**Titre du projet** Surface state and mechanics of nano-objects

**Acronyme** SASHA

**Résumé** When compared to their bulk counterparts, nano-objects are known to benefit of particularly augmented mechanical properties related to their high surface/volume ratio. Nevertheless, this “smaller is stronger” trend is characterized by severe data scattering, merely induced by stress concentration during loading, that impedes quantitative prediction. This behavior cannot be predicted by the current modeling methodology that calls for improper sample geometry, increasing the gap between simulations and experiments. SASHA aims at the development and application of a new nano- by-design methodology to catch stress concentration from the surface of metal and semi-conductor nano-objects (e.g., nanoparticles, nanowires). For the very first time, nano-objects with optimized and realistic surfaces, including surface roughness and chemical alteration (oxidation), will be designed and probed within molecular dynamics and finite-element simulations, via a statistical and quantitative approach. This modeling study will be carried in adequacy with top-of-the-art BCDI and in-situ TEM experiments. The realistic description of nano-objects surfaces is very critical and might bring a new paradigm in the understanding of mechanical properties at the nanoscale.

**Sources de financement**

- Agence Nationale de la Recherche :

**Date de début** 2021-04-05

**Date de fin** 2025-04-05

**Produits de recherche :**

1. Default research output (Jeu de données)

**Contributeurs**

Nom	Affiliation	Rôles
Amodeo Jonathan		<ul style="list-style-type: none"><li>• Coordinateur du projet</li><li>• Personne contact pour les données</li><li>• Responsable de la production ou de la collecte des données</li><li>• Responsable du plan de gestion de données</li></ul>

**Droits d'auteur :**

Le(s) créateur(s) de ce plan accepte(nt) que tout ou partie de texte de ce plan soit réutilisé et personnalisé si nécessaire pour un autre plan. Vous n’avez pas besoin de citer le(s) créateur(s) en tant que source. L’utilisation de toute partie de texte de ce plan n’implique pas que le(s) créateur(s) soutien(nen)t ou aient une quelconque relation avec votre projet ou votre soumission.

# DMP du projet "Surface state and mechanics of nano-objects "

---

## 1. Description des données et collecte ou réutilisation de données existantes

<b>Nom</b>	Default research output
<b>Description</b>	- un code pour la génération de surfaces rugueuses pour applications en dynamique moléculaire (DM) et éléments-finis (EF) - des données de DM et EF
<b>Type</b>	Jeu de données
<b>Workpackage</b>	WP1
<b>Mots clés (texte libre)</b>	
<b>Langue</b>	fra
<b>Contient des données personnelles ?</b>	Ne sais pas
<b>Contient des données sensibles ?</b>	Non
<b>Prend en compte des aspects éthiques ?</b>	Non

---

**Justification** Des données "tests préliminaires" seront réutilisés pour des applications plus précises. Le code développé sera ré-utilisé pour application.

---

**Titre de la méthode** Simulations DM et EF

**Description** Dans SASHA, après le développement d'un outil numérique qui permet de générer des échantillons virtuels, nous utiliserons ce code afin de réaliser des simulations en DM et EF.

**Nature des données** Simulation

---

## 2. Documentation et qualité des données

**Description** des articles scientifiques (potentiellement)

**Références associées**

- article When More Is Less: Plastic Weakening of Single Crystalline Ag Nanoparticles by the Polycrystalline Au Shell : 10.1021/acsnano.1c02976

---

**Description** logiciel, outils vérifiés  
publication dans journal à comité de lecture

---

## 3. Exigences légales et éthiques, code de conduite

**Description** aucun

---

**Description** aucun

---

**Description** aucun

---

## 4. Traitement et analyse des données

**Description** scripts de dépouillement, programmes Python

---

## 5. Stockage et sauvegarde des données pendant le processus de recherche

**Besoins de stockage** ordinateur, disques-dur externe, centre de calcul

**Volume estimé des données** 1

**Unité** To

---

## 6. Partage des données et conservation à long terme

**Modalités de partage** Publication scientifique dans journal à comité de lecture  
Page web ANR SASHA  
HAL  
Conférences scientifiques et séminaires

---

**Justification** Disques durs externes

**Volume estimé des données** 1

**Unité** To

**Archive** :